

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 14.03.02 Ядерная физика и технологии

Отделение ядерно-топливного цикла

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Расчет траектории движения ионов щелочных металлов в водном растворе под действием асимметричного электрического поля

УДК 539.2:546.31:537.21

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А5Д	Абдиянов Алмас Ержанович		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ ИЯТШ	Тимченко С.Н.	к.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОГСН ШИП	Конотопский В.Ю.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЯТЦ ИЯТШ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ядерная физика и технологии	Бычков П.Н.	к.т.н.		

Планируемые результаты обучения

Код результата	Результат обучения
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять глубокие, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания для теоретических и экспериментальных исследований в области использования ядерной энергии, ядерных материалов, систем учета, контроля и физической защиты ядерных материалов, технологий радиационной безопасности, медицинской физики и ядерной медицины, изотопных технологий и материалов в профессиональной деятельности.
P2	Ставить и решать инновационные инженерно-физические задачи, реализовывать проекты в области использования ядерной энергии, ядерных материалов, систем учета, контроля и физической защиты ядерных материалов, технологий радиационной безопасности, медицинской физики и ядерной медицины, изотопных технологий и материалов.
P3	Создавать теоретические, физические и математические модели, описывающие конденсированное состояние вещества, распространение и взаимодействие ионизирующих излучений с веществом и живой материей, физику кинетических явлений, процессы в реакторах, ускорителях, процессы и механизмы переноса радиоактивности в окружающей среде.
P4	Разрабатывать новые алгоритмы и методы: расчета современных физических установок и устройств; исследования изотопных технологий и материалов; измерения характеристик полей ионизирующих излучений; оценки количественных характеристик ядерных материалов; измерения радиоактивности объектов окружающей среды; исследований в радиоэкологии, медицинской физике и ядерной медицине.
P5	Оценивать перспективы развития ядерной отрасли, медицины, анализировать радиационные риски и сценарии потенциально возможных аварий, разрабатывать меры по снижению рисков и обеспечению ядерной и радиационной безопасности руководствуясь законами и нормативными документами, составлять экспертное заключение.
P6	Проектировать и организовывать инновационный бизнес, разрабатывать и внедрять новые виды продукции и технологий, формировать эффективную стратегию и активную политику риск-менеджмента на предприятии, применять методы оценки качества и результативности труда персонала, применять знание основных положений патентного законодательства и авторского права Российской Федерации.
<i>Общекультурные компетенции</i>	
P7	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 14.03.02 Ядерная физика и технологии

Отделение ядерно-топливного цикла

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

(Подпись)

(Дата)

(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
0А5Д	Абдиянов Алмас Ержанович

Тема работы:

Расчет траектории движения ионов щелочных металлов в водном растворе под действием ассиметричного электрического поля	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	1383/с от 21.02.2019

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Задание. Исследование процессов электроиндуцированного переноса сольватированных ионов в растворе хлоридов под действием асимметричного электрического поля
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1. Обзор и анализ литературы 2. Описание математической модели колебания и траектории, оценка скорости движения иона во внешнем асимметричном электрическом поле. 3. Экспериментальное изучение процесса электроиндуцированного переноса сольватированных ионов кальция и магния в растворах электролитов 4. Проверка адекватности модели на основе

	полученных экспериментальных данных. 5. Экономический расчет 6. Охрана труда и техника безопасности 7. Выводы. Заключение
Перечень графического материала	Графики: Колебания иона внутри сферы, образованной молекулами воды в сольватной оболочке, под действием внешнего электрического поля. Расчетная траектория движения иона в водном растворе под действием внешнего электрического поля. График зависимости смещений иона в процессе колебательно-поступательного движения в асимметричном электрическом поле. Влияние частоты налагаемого поля на содержание ионов кальция в рабочих зонах ячейки. Влияние частоты налагаемого поля на содержание ионов магния в рабочих зонах ячейки.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Расчет траектории движения ионов щелочных металлов в водном растворе под действием асимметричного электрического поля	Доцент Отделения ядерно-топливного цикла, к.т.н. Тимченко Сергей Николаевич
Анализ полученных данных	
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент Отделения социально-гуманитарных наук, к.э.н. Конотопский В.Ю.
Социальная ответственность	Ассистент Отделения ядерно-топливного цикла, к.ф.-м.н. Гоголева Т.С.

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ ИЯТШ	Тимченко С.Н.	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А5Д	Абдиянов А.Е.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕДИНЕНИЕ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
0А5Д	Абдиянов Алмас Ержанович

Инженерная школа	ИШЯТ	Отделение	ОЯТЦ
Уровень образования	бакалавр	Направление	14.03.02 «Ядерные физика и технологии»

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	1.Стоимость расходных материалов 2.Тариф на электроэнергию 3.Должностные оклады исполнителей
2. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	1.Ставки НДС и социального налога
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Выполнить
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Выполнить
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Выполнить
Перечень графического материала:	
1. График проведения НИ	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОГСН ШИП	Конотопский В.Ю.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А5Д	Абдиянов А.Е.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0А5Д	Абдиянов Алмас Ержанович

Инженерная школа	ИШЯТ	Отделение	ОЯТЦ
Уровень образования	бакалавр	Направление	14.03.02 «Ядерные физика и технологии»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:	– вредных проявлений факторов производственной среды: микроклимат, шум, вибрация, освещение, электромагнитные поля и ионизирующее излучение от ПЭВМ; – опасных проявлений факторов производственной среды: электрического тока, пожарная и взрывная безопасность;
2. Перечень законодательных и нормативных документов по теме	– требования охраны труда при работе на ПЭВМ; – электробезопасность; – пожаровзрывобезопасность;
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:	– действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защиты).
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности	– электробезопасность (причины, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЯТЦ ИЯТШ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А5Д	Абдиянов А.Е.		

Реферат

Выпускная квалификационная работа: 72 страниц, 16 рисунков, 12 таблиц.

Ключевые слова: математическая модель, колебания, траектория, дрейф, селективный ион, аквакомплекс, очистка, разделение веществ, раствор.

Объектом исследования в данной работе является обнаруженный процесс электроиндуцированного дрейфа сольватированных катионов металлов в водных растворах солей под действием внешнего периодического асимметричного электрического поля.

Цель работы – разработка математической модели электроиндуцированного дрейфа заряженных частиц в растворах.

В процессе работы была разработана модель поведения иона в асимметричном электрическом поле, были проведены опыты с экспериментальной установкой и произведена статистическая обработка полученных результатов эксперимента.

В результате исследований была получена общая картина явления селективного дрейфа сольватированных катионов металлов в водных растворах солей под действием внешнего периодического асимметричного электрического поля, а именно функция колебаний иона, траектория движения иона, оценена скорость дрейфа иона в растворе. На основе проведенных экспериментов был подтвержден эффект разделения на основе выше описанного явления.

Область применения данного метода могут быть различны. Например, очистка воды для атомных электростанций, переработка радиоактивных отходов, получение особо чистых веществ в медицине и так далее.

Определения

Аквакомплекс — вид комплексных химических соединений, содержащих в качестве лигандов (ион, атом или молекула, связанная с неким центром) одну или несколько молекул воды.

Дрейф — относительно медленное направленное перемещение частиц под действием различных причин, налагающееся на их основное движение

Сольватированный ион — ион, захваченный средой в результате поляризации окружающих молекул.

Ассиметричный потенциал — потенциал, в котором абсолютные значения амплитуд полупериодов отличаются

Раствор — однородная смесь, переменного, или гетерогенного, состава, состоящая из двух или более компонентов.

Траектория иона — линия в пространстве, вдоль которой движется ион в растворе.

Оглавление	
Реферат	7
Определения	8
Введение.....	11
1 Действие электрических полей на электролиты	14
1.1 Электролиз.....	14
1.2 Электродиализ.....	16
1.3 Действие асимметричного переменного электрического поля на растворы солей в диэлектрических жидкостях.....	18
2 Математическая модель эффекта	20
2.1 Действие внешнего электрического поля на свободные и связанные заряды в растворе	25
2.2 Уравнение колебаний иона относительно молекул растворителя.....	27
2.3 Учет трения сольватированного иона с окружающими молекулами растворителя	32
3 Экспериментальная часть.....	37
4 Результаты эксперимента	40
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение...	43
5.1 Организация и планирование работ.....	43
5.1.1 Продолжительность этапов работ	44
5.1.2 Расчет накопления готовности проекта	49
5.2 Расчет сметы на выполнение проекта.....	50
5.2.1 Расчет затрат на материалы	50
5.2.2 Расчет заработной платы.....	51
5.2.3 Расчет затрат на социальный налог.....	52
5.2.4 Расчет затрат на электроэнергию	53
5.2.5 Расчет амортизационных расходов	54
5.2.6 Расчет прочих расходов.....	55
5.2.7 Расчет общей себестоимости разработки	55
5.2.8 Расчет прибыли	56

5.2.9 Расчет НДС	56
5.2.10 Цена разработки	56
5.3 Оценка экономической эффективности проекта	56
6. Социальная ответственность	57
6.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	58
6.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ.....	59
6.2.1 Организационные мероприятия.....	59
6.2.2 Технические мероприятия.....	59
6.3 Условия безопасной работы	62
6.4 Электробезопасность	64
6.5 Пожарная и взрывная безопасность.....	65
Заключение	68
Список использованных источников	70

Введение

В условиях современного развития машиностроения, металлообработки, использования аккумуляторных батарей, с появлением высокотемпературных сверхпроводников, с ростом процессов глубокой переработки нефтяного сырья, с развитием атомной промышленности, квантовой электроники, ядерной медицины возникает необходимость наработки и получения особо чистых органических и неорганических веществ.

В современном мире очень остро стоят вопросы, связанные с ухудшением экологической обстановки. Радиоактивные отходы, получаемые с предприятий, работающих по открытому ядерно-топливному циклу, несут в себе определенную опасность и требуют большого количества денежных ресурсов для содержания в обособленных специализированных учреждениях. Проблема получения большинства востребованных в медицине изотопов также состоит в выделении и очистке от радиоактивных примесей целевого продукта. Таким образом, негативное влияние продуктов некоторых производств на жизнедеятельность можно решить, имея необходимые методы выделения и концентрирования веществ и элементов.

При этом проблема выделения целевых изотопов определенных элементов во многом заключается в «чистоте» того или иного метода, потому как большинство методов предлагает получение веществ с большим количеством примесей. Таким образом, появляется проблема, связанная не столько с получением нужного вещества, сколько с выделением его из полученного при разделении комплекса веществ, в котором наряду с ценным компонентом присутствует большое количество сторонних элементов. Например, радионуклид ^{99}Mo , который является одним из самых востребованных изотопов на рынке ядерной медицины, получают, в основном, в процессе облучения мишеней в виде сплава ^{235}U со вспомогательными металлами (чаще всего таковым является Al) либо порошка в виде диоксида урана (UO_2) или закиси-окиси (U_3O_8) с различной степенью обогащения урана.

Целевой изотоп получают путем тонкой очистки экстракта, полученного при растворении облученной мишени в сильных кислотах [1]. Также с помощью реакторного производства производят такие востребованные в медицине изотопы, как ^{90}Sr , $^{117\text{m}}\text{Sn}$, ^{131}Cs , ^{125}I , ^{103}Pd и др. В процессе такого производства образуется огромное количество радиоактивных нуклидов, негативно влияющих на экологию и создающих определенные проблемы при выделении целевого компонента.

В современных реалиях наибольший интерес в области разделения и тонкой очистки веществ представляют безреагентные методы, не приводящие к накоплению нового большого количества примесей и отходов. Данные методы интересны также в качестве промежуточной ступени для очистки веществ от примесей с дальнейшим выделением целевого компонента реагентными методами с образованием меньшего количества отходов.

Таким образом, на сегодняшний день определенный интерес представляет метод, основанный на использовании явления селективного электроиндуцированного дрейфа ионов различных металлов в растворах полярных диэлектриков под действием внешнего переменного асимметричного электрического поля [2], преимущества которого заключаются в его простоте, экономичности производства и экологической безопасности. Однако для успешного использования данного эффекта необходимо знать и заранее предугадать некоторые технологически важные параметры, такие как скорость направленного дрейфа сольватированных ионов, параметры их движения, частоты изменения напряжения, вызывающего эффект разделения, а также траекторию движения ионов.

Необходимость определения характера и траектории движения иона в процессе разделения диктуется условиями для более глубокого понимания и дальнейшего изучения процесса селективного дрейфа.

Таким образом, целью данной работы является разработка математической модели электроиндуцированного дрейфа заряженных частиц в растворах.

Задачи:

- определение функции колебаний иона, учет влияния трения на данную функцию;
- определение траектории и скорости движения иона;
- проверка полученных уравнений и зависимостей на результатах, полученных при проведении эксперимента.

1 Действие электрических полей на электролиты

Электролиты – это водные растворы солей, кислот, щелочей. Как известно, электролиты являются проводниками второго рода, то есть электрический ток в них проводят ионы (ионная проводимость). В растворе, на который действует внешнее электрическое поле, происходят некоторые фундаментальные процессы и явления, которые приводят к абсолютно различным эффектам и поведению частиц, содержащихся в растворе. При этом на характер и поведение этих частиц влияет не только род и вид внешнего взаимодействия, но и параметры и конфигурация поля, в которое помещен раствор. Таким образом, в зависимости от вида, характеристик и различных конкретных значений параметров задаваемого электрического поля природа поведения частиц будет различна.

1.1 Электролиз

Одним из самых важных и изученных направлений в электрохимии на сегодняшний день является электролиз. Еще в 19 веке было установлено, что при прохождении постоянного тока через растворы солей происходят некоторые реакции превращения и образования новых веществ [3].

Так называемыми первичными реакциями взаимодействия веществ в растворе называют реакции диссоциации в электролите. Затем под действием поля образованные при диссоциации ионы упорядоченно движутся в электрическом поле, создаваемом электродами, которые, с свою очередь, являются проводниками электрического тока, соединенными с источником постоянного тока (рисунок 1). При этом положительные ионы движутся по направлению к катоду (отрицательно заряженный электрод), а отрицательные ионы – к аноду (электрод, заряженный положительно) [4]. Химические реакции, обусловленные взаимодействием ионов с соответствующими электродами, называются вторичными. Разделение реакций, протекающих при

электролизе, на первичные и вторичные позволили Майклу Фарадею установить два общеизвестных закона, описывающих процесс электролиза.

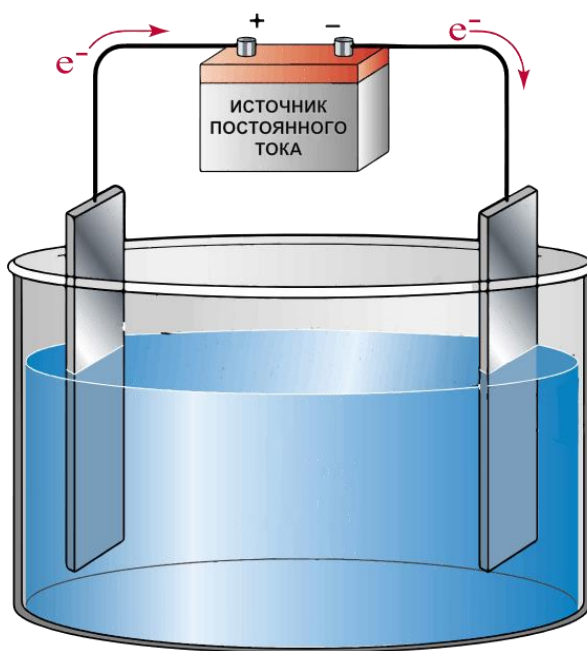


Рисунок 1. Простейшая схема реализации электролиза

Электролиз являет собой сложную систему процессов, среди которых: миграция положительных и отрицательных ионов к электродам, диффузия ионов, реакция электрохимического разложения молекул растворенных веществ, вторичные реакции элементов-продуктов электролиза между собой, с элементами электродов и электролитом. Открытие данного явления в свое время послужило катализатором процесса развития электрохимии, как науки в целом.

В промышленности с помощью электролиза получают алюминий, медь, кислород, диоксид марганца, пероксид водорода. В металлургии электролиз используют для выделения металлов из руд, рафинирования металлов. Данный процесс используют также при нанесении покрытий, для воспроизведения формы предметов. Электролиз широко применяется для очистки вод и получения урана, циркония, алюминия, бериллия, титана и ряда других металлов.

1.2 Электродиализ

Еще одним процессом, в котором используется постоянное электрическое поле, создаваемое электродами, является электродиализ. В процессе электродиализа под действием поля возникает упорядоченное движение ионов, образованных при распаде веществ, растворенных в растворе, через мембрану, при этом посредством изменения силы тока можно влиять на скорость переноса ионов. Особенностью данного процесса является возможность движения частиц против градиента концентрации [5].

На ранних стадиях исследований процесса электродиализа эксперименты проводились в ячейках, преимущественно состоящих из трех камер, разделенных неселективными мембранами. При такой схеме в средней камере происходило обессоливание водных растворов солей. Но при этом раствор насыщался H^+ -ионами и обретал кислые свойства, что приносило неудобства и являлось большим недостатком. Но кроме этого, применение неселективных мембран сильно понижает выход по току.

Для решения данной проблемы в качестве перегородок используют селективные ионообменные мембраны, которые пропускают сквозь себя только ионы определенного знака. Катионитовые мембраны состоят из ионогенных групп с отрицательным зарядом, а анионитовые, наоборот, из ионогенных групп с положительным зарядом. Таким образом, мембраны способствуют протеканию ионов определенного знака и задержке противоположно-заряженных ионов [6].

Современные ячейки электродиализаторов состоят из n -го количества секций, разделенных перегородками из селективных мембран (рисунок 2). Число камер, помещаемых между электродами в многокамерной ячейке ограничено только требуемыми характеристиками. При наложении поля ионы начинают движение к соответствующим электродам и, благодаря селективности мембран, задерживаются в определенных ячейках. Таким

образом, в многокамерной ячейке образуются три зоны с различной концентрацией ионов.

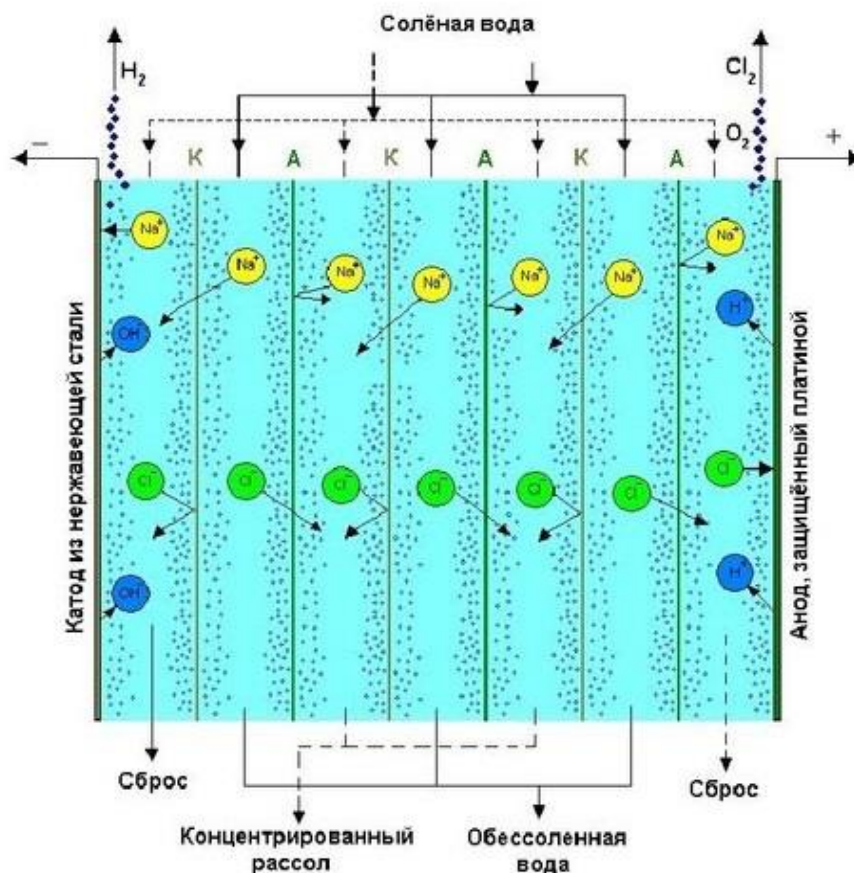


Рисунок 2. Схема проведение электродиализа для обессоливания воды

Эффективность процесса электродиализа с селективными мембранами напрямую зависит от качества материала, из которого изготавливают мембраны. При этом материал электродов также играет большую роль, так как существует проблема загрязнения растворов веществами, образованными в результате коррозии металлов, из которых изготовлены электроды. Поэтому электроды таких установок изготавливают из особо чистого графита или платины [7].

На процесс также влияют и сами диафрагмы, которые с течением времени накапливают большое количество загрязнений, виду чего в тех или иных областях возле мембран образуются зоны с различными значениями рН

раствора. Задержка на мембранах большого количества примесей и загрязнений ведет к снижению выхода по току и повышению сопротивления мембран. Для борьбы с этим явлением используют смену направлений потоков рабочих растворов и полярности электродов [8]. Таким образом, еще одним условием успешного применения установки является стойкость электродов и мембран к различным видам активности продуктов раствора.

Электродиализ в промышленных масштабах применяется для опреснения морской воды с целью получения питьевой воды и очистки и обессоливания воды с высоким содержанием растворенных солей.

1.3 Действие асимметричного переменного электрического поля на растворы солей в диэлектрических жидкостях

Эффект электроиндуцированного селективного дрейфа ионов был обнаружен случайно во время проведения экспериментов по изучению воздействия внешнего периодического электрического поля на водные растворы солей.

Экспериментальная установка представляла собой ячейку, заполненную водным раствором и расположенную между плоскими пластинами, на которые с помощью генератора напряжений подавался периодический сигнал. При этом электроды (пластины) были изолированы от общего объема сосуда и не вступали в контакт с раствором.

В ходе одного из экспериментов было обнаружено, что воздействие поля на раствор в течение нескольких часов вызывало образование щелочной среды в приграничной к одной из пластин зоне в то время как при выключенном генераторе раствор возвращал свои нормальные свойства.

Как оказалось, причина этого явления заключалась в неисправности источника напряжения, ввиду чего на пластины, изолированные от раствора, подавался искаженный сигнал: одна из полуволн синусоидального сигнала

имела меньшую амплитуду, вследствие чего раствор в области, находящейся у одной из пластин, приобретал щелочные свойства.

Таким образом, искажения, приведшие к изменению симметрии сигнала напряжения, подаваемого на электроды, привели к некоторому эффекту разделения, который проявлялся в концентрировании ионов определенного знака в ограниченной области ячейки, содержащей раствор.

Открытие явления электроиндуцированного селективного дрейфа катионных аквакомплексов в водных растворах солей, особенность которого заключается в неравности амплитуд напряжения в полупериодах, ставило перед исследователями много вопросов. Классические модели, приближенно подходящие данному явлению, не дали возможности получить исчерпывающие результаты, коррелирующие с наблюдаемыми в эксперименте эффектами, вследствие чего существует потребность поиска новых моделей и приближений.

2 Математическая модель эффекта

Закон сохранения импульса дает возможность определить понятия покоя и движения системы материальных точек. Аддитивность массы позволяет определить скорость и массу системы материальных точек, состоящей из множества частиц, как скорость и массу каждой из них, то есть значение импульса системы равно сумме импульсов частиц, входящих в нее [9].

Скорость системы связанных материальных точек можно определить, как скорость движения центра инерции системы, при этом момент импульса, не зависящий от взаимодействия частиц между собой, в движущейся системе сохраняется:

$$\vec{M} = \sum_i [\vec{r}_i \vec{p}_i] = const. \quad (2.1)$$

Сформулируем математическую модель процесса, поместив поляризованный аквакомплекс в плоскость XOY. Аквакомплекс, имеющий четко выраженные положительную и отрицательную части, в данном случае можно рассматривать, как диполь. Силы, действующие на части данного диполя также расположены в плоскости XOY и направлены параллельно вектору напряженности поля (т.е. вдоль оси OX). Схематичное представление картины представлено на рисунке 3.

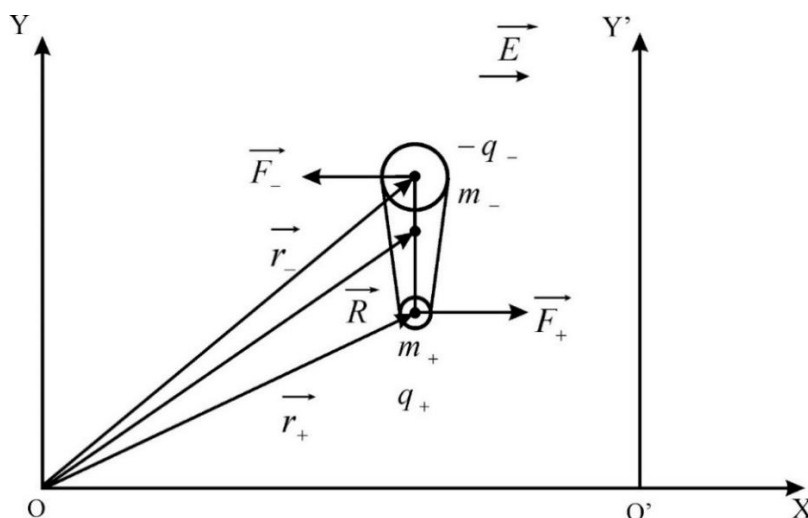


Рисунок 3. Поляризованный аквакомплекс в электрическом поле:

q и m – абсолютные значения заряда и массы отрицательной (–) и положительной (+) частей, соответственно

Вектор напряженности электрического поля, создаваемого электродами, также находится в плоскости XOY и не равен нулю: E_x является знакопеременной функцией с асимметричным сигналом, изменяющемся по времени (Рисунок 4). Заземленный и потенциальный электроды расположены в плоскостях YOZ и $Y'O'Z'$, соответственно.

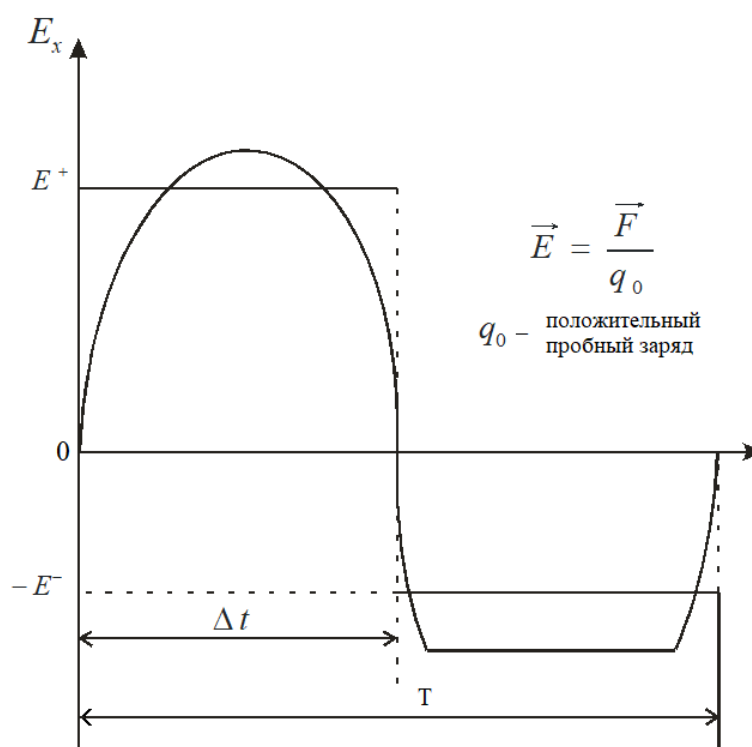


Рисунок 4. Напряженность асимметричного электрического поля:

E^+ и E^- – действующие значения напряженности в положительном и отрицательном полупериодах, соответственно

Численное описание процесса селективного дрейфа состоит в разбиении исходной системы уравнений по временным интервалам и периодическом повторении шагов по времени [10]. Расчет каждого временного шага $2\Delta t$ разбивается на три этапа [11].

В течение первого этапа за счет действия первого полупериода электрического сигнала момент импульса приращается на значение $\Delta \vec{M}_1$.

Проекции импульсов положительной и отрицательной сторон диполя на это этапе определяются выражениями:

$$\begin{aligned} p_+ &= E^+ q_+ \Delta t, \\ p_- &= -E^+ q_- \Delta t. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Изменение момента импульса $\Delta \vec{M}_2$ на втором этапе происходит за счет действия второго полупериода сигнала электрического поля. При этом предполагается, что диполь по отношению к вектору напряженности электрического поля имеет ту же ориентацию и то же положение в плоскости ХОУ, что и на первом этапе. Проекции импульсов положительной и отрицательной сторон диполя на это этапе определяются выражениями:

$$\begin{aligned} p_+ &= -E^- q_+ \Delta t, \\ p_- &= -E^- (-q_-) \Delta t = E^- q_- \Delta t. \end{aligned} \quad (2.3)$$

На третьем этапе определяется некомпенсированная часть момента $\Delta \vec{M} = \Delta \vec{M}_1 + \Delta \vec{M}_2$, скорость поступательного движения $\vec{V}$ и, как следствие, перемещение центра инерции.

Ниже на рисунке 5 продемонстрирован предполагаемый вид траектории двух изотопов катионных аквакомплексов, находящихся в растворе под действием внешнего асимметричного электрического поля. Отличие траекторий диктуется различными массами положительных частей аквакомплексов (масса положительной части второго аквакомплекса больше соответствующей массы первого аквакомплекса).

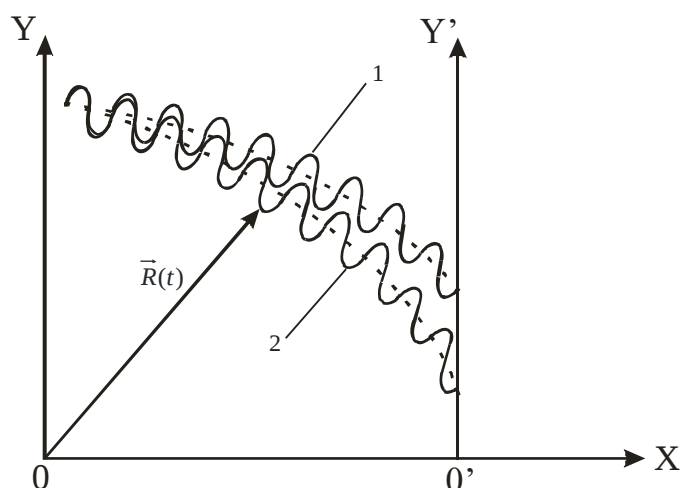


Рисунок 5. Предполагаемый вид траекторий $\vec{R}(t)$ двух изотопов одного вещества

Аквакомплекс 1 движется по направлению оси ОХ быстрее, чем более тяжелый аквакомплекс 2, и раньше достигает плоскости потенциального электрода (плоскость $Y'O'Z'$). Путь, который проходит аквакомплекс 2 до достижения данной плоскости оказывается больше соответствующего пути для аквакомплекса 1. Таким образом, в растворе за плоскостью потенциального электрода происходит обогащение аквакомплексами 1. Но ввиду хаотического движения молекул и ионов, вектор скорости частиц будет изменяться произвольным образом, в связи с чем образующие линий траекторий будут ломаными.

В целях достижения хорошего эффекта следует создавать такие условия, при которых аквакомплекс за время действия на него первого полупериода сигнала не смог совершить полный оборот вокруг своей оси. Существует также возможность создания условий, при которых не будет наблюдаться поступательного движения аквакомплекса.

На рисунке 6 представлена картина изменения состава раствора в процессе действия на раствор асимметричного поля, формируемого двумя электродами. Буквами «А» и «Б» обозначены точки отбора проб.

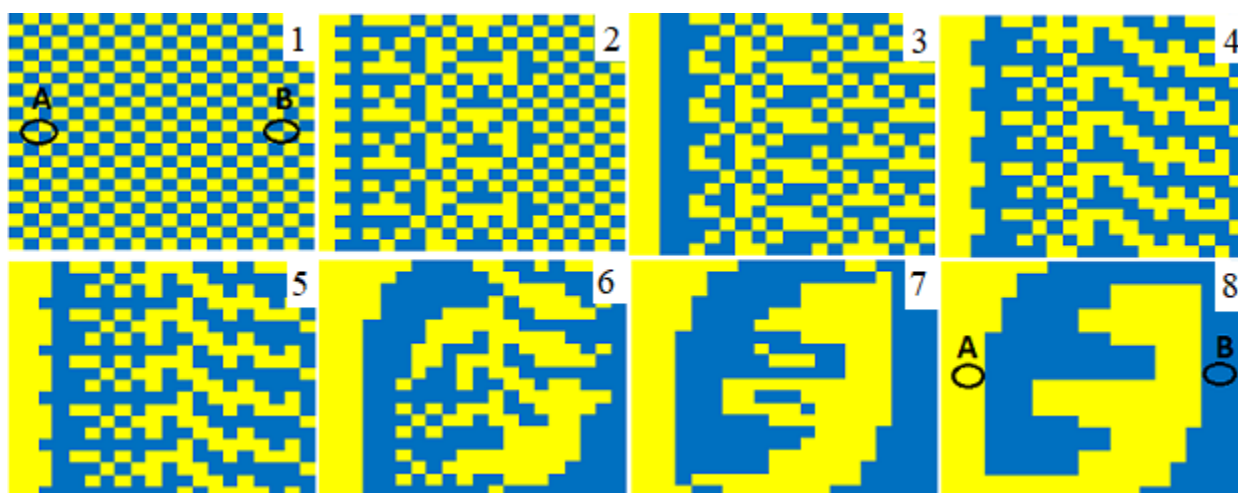


Рисунок 6. Предполагаемый вид процесса массопереноса в объеме и изменение содержание двух солей в частях раствора

В начальный момент времени (1) концентрации ионов двух солей (на рисунке обозначены различными цветами) во всем объеме ячейки равны и распределены равномерно. Воздействие электрического поля асимметричной формы возбуждает процесс селективного дрейфа и различия свойств катионов, образованных в результате диссоциации солей в растворе, приводят к изменению структуры данного раствора (2-7). В конце концов (8), в соответствующих областях пробоотбора находятся только ионы одного типа [12].

Изучения и практическое использование обнаруженного эффекта селективного дрейфа ионов в растворах солей требует наличия ясной качественной картины явления.

Для определения траектории движения и скорости частиц при электроиндуцированном дрейфе сольватированного иона необходимо определить и описать колебания данного иона в электрическом поле внешнего асимметричного сигнала. При этом внешнее поле также действует на частицы сольвента, а ионы обладают собственным полем и имеет место воздействие данного поля на молекулы, находящиеся вблизи иона. Поэтому определение параметров колебания иона во внешнем – не простая задача.

Для определения уравнения колебания иона необходимо учесть взаимодействие электрических полей с учетом некоторого распределения зарядов, имеющих в растворе соли в полярной диэлектрической жидкости.

2.1 Действие внешнего электрического поля на свободные и связанные заряды в растворе

Связь напряженности внешнего поля $\vec{E}(\vec{r})$ и распределения объемной плотности заряда $\rho(\vec{r})$ можно связать уравнением Пуассона[13]:

$$\operatorname{div}\vec{E}(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r}). \quad (2.1.1)$$

Распределение поля, образованного ионами, возникшими в результате диссоциации молекул соли, растворенной в жидкости, также описывается уравнением Пуассона:

$$\operatorname{div}\vec{E}_f(\vec{r}) = 4\pi\rho_f(\vec{r}). \quad (2.1.2)$$

Поле свободных носителей зарядов (ионов) воздействует на молекулы растворителя и поляризуют их [14]. При этом:

$$\operatorname{div}(\vec{E}(\vec{r}) + 4\pi\vec{P}(\vec{r})) = 4\pi\rho(\vec{r}), \quad (2.1.3)$$

где $\vec{P}(\vec{r})$ - распределение плотности поляризации. Причем уравнение (2.1.3) не зависит от связи напряженности поля и распределения плотности поляризации.

Воздействие на раствор поля приводит к возникновению некоторой объемной плотности заряда, то есть напряженность электрического поля нарушает электрическую нейтральность жидкости. Причем данные заряды возникают только за счет неоднородности поляризации молекул жидкости и являются связанными. Распределение объемной плотности таких зарядов $\rho_b(\vec{r})$ определяется соотношением:

$$\rho_b(\vec{r}) = -\operatorname{div}\vec{P}(\vec{r}). \quad (2.1.4)$$

Объемный заряд состоит из плотностей свободных и связанных зарядов, которые проявляются при воздействии неоднородной поляризации $\vec{P}(\vec{r})$.

Рассмотрим для простоты сечение прямоугольной ячейки: раствор является плоским слоем с поперечными размерами много больше его толщины. Плотность поляризации в таком случае связана с напряженностью внешнего электрического поля $\vec{E}_0$, образованного плоскопараллельными изолированными от раствора электродами, соотношением:

$$4\pi\vec{P} = \vec{E}_0 - \vec{E}, \quad (2.1.4)$$

где $\vec{E}$ – напряженность электрического поля, действующего на раствор и создаваемого изолированными электродами.

В растворе напряженность поля сильно зависит от координаты, вдоль которой это поле направлено, поэтому усредненное по всей длине ячейки значение напряженности $\langle E \rangle$ меньше значения напряженности вблизи электродов E_0 . Отношение напряженности поля, создаваемого электродами к его среднему по объему значению можно оценить с помощью уравнения (2.1.3) и связи плотности поляризации и напряженности поля, которое вызывает поляризацию диэлектрика:

$$\vec{P} = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \right) \vec{E}, \quad (2.1.5)$$

где ε - диэлектрическая проницаемость растворителя.

Так как поле образовано зарядом с объемной плотностью ρ , электрическое поле которого вызывает поляризацию, уравнение (2.1.3) можно записать как:

$$\left(1 + 3 \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \right) \right) \text{div} \vec{E} = 4\pi\rho. \quad (2.1.6)$$

Анализируя данное уравнение, можно сказать, что при одинаковой плотности заряда ρ поляризация вызывает уменьшение напряженности электрического поля в $\left(1 + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)\right)$ раз.

Так как напряженность поля зависит от координаты и значительно уменьшается при удалении от электродов, значение плотности связанных зарядов $\rho_b(\vec{r})$ будет отличной от нуля только в приэлектродных областях раствора, потому как на достаточном удалении от электродов напряженность поля будет уменьшаться и иметь постоянное значение. При этом плотность поляризации также не будет заметно изменяться, а $\text{div}\vec{P}(\vec{r})$ будет стремиться к нулю. Поэтому плотность связанных зарядов $\rho_b(\vec{r})$ согласно уравнению (2.1.4) с увеличением расстояния от электродов также будет стремиться к нулю.

Исходя из всего сказанного, уравнение связи напряженности электрических полей с плотностью свободных зарядов в растворе соли будет иметь вид:

$$\text{div}\left(\vec{E}_f(\vec{r}) + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)(\vec{E}_0(\vec{r}) + \vec{E}_f(\vec{r}))\right) = 4\pi\rho_f(\vec{r}). \quad (2.1.7)$$

Если раствор находится между плоскими изолированными электродами, на которые наложено поле, то для плоского сечения данного раствора уравнение запишется в виде:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(E_f(x) + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)(E_0(x) + E_f(x))\right) = 4\pi\rho_f(x), \quad (2.1.8)$$

или:

$$\left(1 + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)\right)\frac{\partial E_f(x)}{\partial x} + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)\frac{\partial E_0(x)}{\partial x} = 4\pi\rho_f(x). \quad (2.1.9)$$

2.2 Уравнение колебаний иона относительно молекул растворителя

Продифференцируем полученное уравнение по времени:

$$\left(1 + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right)\right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_f(x)}{\partial x} \right) + 3\left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}\right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_0(x)}{\partial x} \right) = 4\pi \frac{\partial \rho_f(x)}{\partial t}. \quad (2.2.1)$$

Правый член данного уравнения можно выразить через плотность тока ионов j_{ion} :

$$4\pi \frac{\partial \rho_f(x)}{\partial t} = 4\pi \frac{\partial j_{ion}}{\partial x}. \quad (2.2.2)$$

Один ион, находящийся в растворе, создает электрическое поле, напряженность которого описывается функцией:

$$E_f(x) = kq_{ion} \frac{x - x_0(t)}{|x - x_0(t)|^3}, \quad (2.2.3)$$

где k - константа, q_{ion} - электрический заряд иона, $x_0(t)$ - координата иона, которая изменяется во времени по причине движения иона во внешнем электрическом поле. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_f(x)}{\partial x} \right) = kq_{ion} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|x - x_0(t)|^3} - 3 \frac{1}{(x - x_0(t))^3} \right) \quad (2.2.4)$$

и

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_f(x)}{\partial x} \right) = -6 \frac{kq_{ion}}{(x - x_0(t))^4} \frac{\partial x_0(t)}{\partial t} = -6 \frac{kq_{ion}}{(x - x_0(t))^4} v_{ion}(t), \quad (2.2.5)$$

где $v_{ion}(t) = \frac{\partial x_0(t)}{\partial t}$ - скорость направленного движения ионов. Принимая во

внимание, что плотность тока ионов $j_{ion} = nq_{ion}v_{ion}$, где n - плотность ионов.

Уравнение для координаты иона, который находится в растворе соли в полярной диэлектрической жидкости с большой диэлектрической проницаемостью:

$$-24 \frac{kq_{ion}}{(x - x_i(t))^4} \frac{\partial x_i(t)}{\partial t} + 3 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_0(x)}{\partial x} \right) = 4\pi \frac{\partial n}{\partial x} q_{ion} \frac{\partial x_i(t)}{\partial t}, \quad (2.2.6)$$

или

$$\left(4\pi \frac{\partial n}{\partial x} + 24 \frac{k}{(x - x_i(t))^4}\right) q_{ion} \frac{\partial x_i(t)}{\partial t} = 3 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_0(x)}{\partial x} \right), \quad (2.2.7)$$

где k – коэффициент пропорциональности в формуле Кулона: $k \approx 9 \cdot 10^9$.

Как было сказано выше в данном случае мы рассматриваем одномерную геометрию некоторого сечения ячейки (рисунок 7):

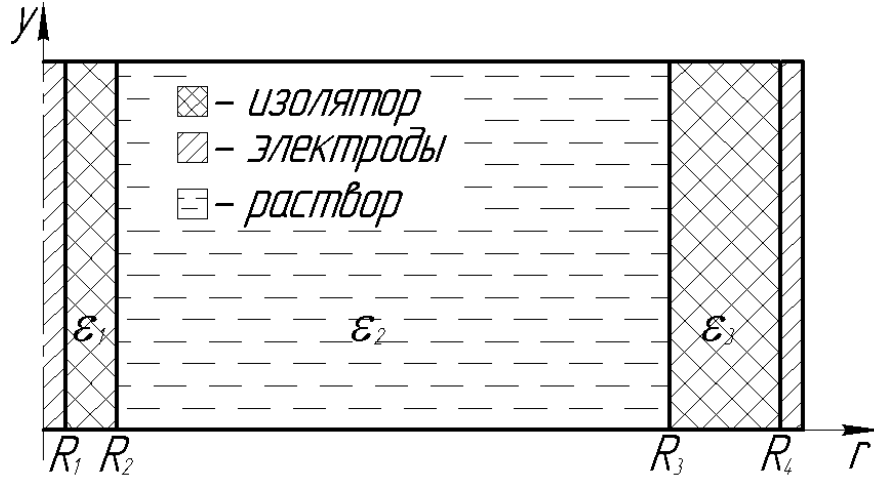


Рисунок 7. Цилиндрическая ячейка в разрезе

Здесь электроды отделены от общего объема раствора изоляторами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_3 , ε_2 – диэлектрическая проницаемость раствора, R_1, R_2, R_3, R_4 – границы первого изолятора, граница раствора около первого изолятора, граница раствора около второго изолятора, граница второго изолятора соответственно.

Для создания сигнала асимметричной формы на изолированные от раствора электроды генератором подавалось напряжение:

$$U(t) = U_0(1 - 2\sin[\omega t] - \sin[2\omega t]), \quad (2.2.8)$$

где U_0 – амплитуда внешнего электрического поля, подаваемого на изолированные электроды, В; ω – циклическая частота внешнего электрического поля; t – время, с. Напряженность электрического поля при этом определяется согласно выражению:

$$E_0(r, t) = \frac{U(t)}{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \cdot \ln \frac{R_2}{R_1} + \ln \frac{R_3}{R_2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3} \cdot \ln \frac{R_4}{R_3}} \cdot \frac{1}{r}, |R_2 \leq r \leq R_3|. \quad (2.2.9)$$

Выберем некоторую точку в объеме раствора $X=a$, в которой известен градиент напряженности поля, изменяющийся во времени (следует понимать, что в данном приближении величины X и r идентичны). В экспериментах по возбуждению селективного дрейфа сольватированных ионов [15]

$$f(t) = \frac{\partial E_0(a)}{\partial x} \approx A(1 - 2\sin[\omega t] - \sin[2\omega t]), \text{ где значение константы } A \approx 4 \cdot 10^6 \frac{\text{В}}{\text{м}^2}.$$

Уравнение для колебаний иона $\Delta(t)$ в растворе под действием внешнего электрического поля запишется в виде:

$$24kq_{ion} \frac{1}{\Delta(t)^4} \frac{\partial}{\partial t} \Delta(t) = 6A\omega(\cos \omega t - \cos 2\omega t), \quad (2.2.10)$$

или

$$\frac{1}{\Delta(t)^4} \frac{\partial}{\partial t} \Delta(t) = \frac{A\omega}{4kq_{ion}} (\cos \omega t - \cos 2\omega t). \quad (2.2.11)$$

Решение уравнения (2.2.11) имеет вид [16]:

$$\Delta(t) = \left(\frac{3A}{8kq_{ion}} (\sin 2\omega t - 2\sin \omega t) + C \right)^{-1/3}, \quad (2.2.12)$$

где константа C определяется из условия $\Delta(t=0) = a$.

Частота колебаний $\omega = 2\pi\gamma$ совпадает с частотой внешнего электрического поля и представляет собой частоту колебаний иона относительно сольватной оболочки. Колебания иона инициируют поступательное движение, если частота внешнего поля совпадает с собственной частотой сольватированного иона, то есть системы: ион – сольватная оболочка [17]. Интенсивность данного движения прямо пропорциональна разности амплитуд колебаний иона от нулевого положения в течение положительного и отрицательного полупериодов колебаний налагаемого внешнего поля.

Результаты численного расчета параметров колебания иона в растворе соли в диэлектрической жидкости при наложении на раствор асимметричного электрического поля представлены ниже на рисунке 8.

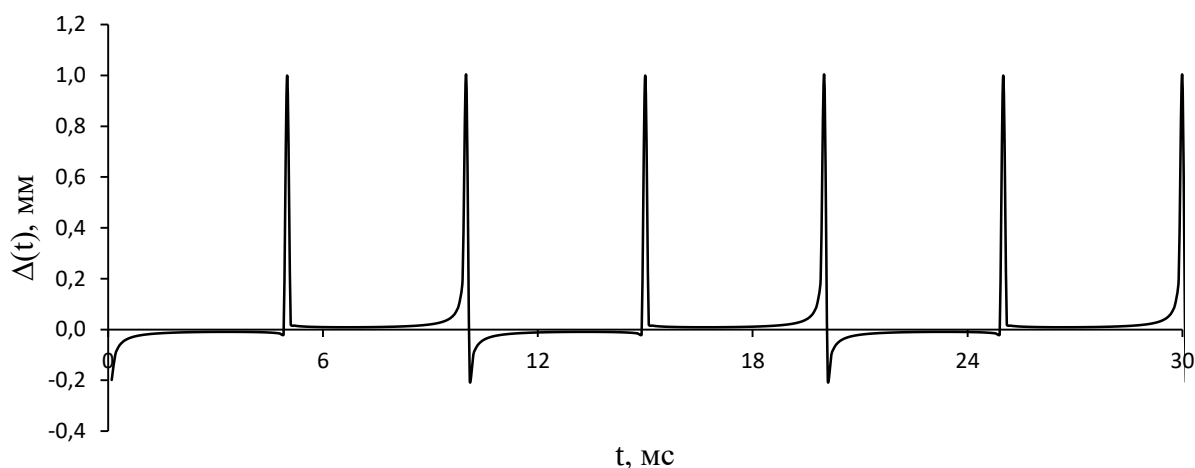


Рисунок 8. Колебания иона внутри сферы, образованной молекулами воды в сольватной оболочке, под действием внешнего электрического поля

Рисунок 9 иллюстрирует колебания иона ввиду действия асимметричного сигнала, причем амплитуда колебания во время положительной полуволны превышает по абсолютному значению амплитуду колебания во время отрицательной полуволны. Разность данных значений представляет собой отрезок траектории дрейфа иона в направлении одного из электродов. Таким образом, проходя за некоторый отрезок времени dt путь dl_+ , ион, испытывая «отрицательное» действие, за такой же промежуток времени dt , двигаясь в обратном направлении, проходит путь dl_- , причем $dl_+ > dl_-$. Условную формулу для численного расчета траектории можно представить, как:

$$dl = \sqrt{d\Delta(t)^2 + dt^2}, \quad (2.2.13)$$

где $d\Delta(t)$ - изменение амплитуды колебаний за время dt ; $dl = dl_+ - dl_-$ - путь, пройденный ионом за время dt . Результат для численного расчета траектории движения иона представлен на Рисунке 9.

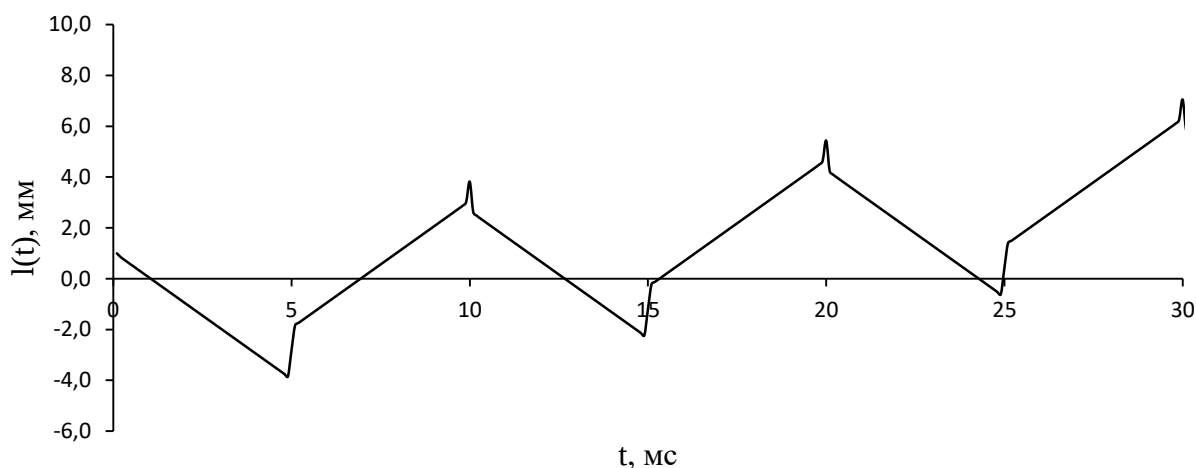


Рисунок 9. Расчетная траектория движения иона в водном растворе под действием внешнего электрического поля

Очевидно, что траектория движения иона, рассчитанная с помощью полученного уравнения, лишь качественно описывает картину, так как при постановке задачи не было учтено трение сольватированного иона с окружающими молекулами растворителя, что значительно уменьшает амплитуды смещений иона. Значение константы A , которая входит в решение, определяется не столько амплитудой напряженности внешнего электрического поля, сколько распределением поля в объеме растворителя в межэлектродном зазоре, то есть свойствами растворителя как полярного диэлектрика. Чем больше градиент напряженности в межэлектродном зазоре, тем больше значение A .

2.3 Учет трения сольватированного иона с окружающими молекулами растворителя

Результирующий эффект, обусловленный трением осциллирующего во внешнем поле иона с окружающими молекулами, можно оценить количественно. Для этого запишем уравнение движения для иона, на который действует внешняя сила F , косинусоидально изменяющаяся во времени, а также возвращающая сила и сила сопротивления (трения):

$$\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{F}{m} \cos \gamma t, \quad (2.3.1)$$

где m – масса иона; γ – частота изменения внешнего электрического поля, создающего силу; второе слагаемое учитывает силу трения, пропорциональную скорости; третье слагаемое учитывает возвращающую силу, пропорциональную смещению из положения равновесия. Силу трения, действующую на сольватированный ион, можно определить по закону Стокса:

$$F_1 = 6\pi r \eta \dot{x}, \quad (2.3.2)$$

где r – радиус сольватированного иона, η – динамическая вязкость сольвента.

Таким образом $\lambda = \frac{3\pi\eta r}{m}$. Значение ω_0^2 определяется как $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, где k – коэффициент, аналогичный коэффициенту жесткости для пружины, если рассматривать кластер, образованный центральным ионом и ассоциированными вокруг него молекулами растворителя, как полую сферическую оболочку с внутренним радиусом R_1 , внешним радиусом R_2 и массой M . Такая оболочка может вращаться вокруг своей геометрической оси, и она соединена с осью упругой спиральной пружины с жесткостью k , с помощью которой обеспечивается устойчивое положение. Жесткость пружины k определяется энергией связи иона с молекулами сольвента вокруг него. Молекулы сольвента расположены на расстоянии R_1 от иона, а количество молекул на данном радиусе определяется координационным числом определенного иона.

Частота собственных колебаний такого маятника определяется по формуле:

$$\nu = \sqrt{\frac{k}{J}}, \quad (2.3.3)$$

где J – момент инерции маятника, определяемый по формулам:

$$J = \frac{2}{5}MR_2^2 - \text{ для случая } R_2 > R_1, \quad (2.3.4)$$

$$J = \frac{2}{3} M \left(\frac{R_1 + R_2}{2} \right)^2 - \text{для случая } R_2 < R_1. \quad (2.3.5)$$

Жесткость спиральной пружины k определяется из условия равенства двух работ $A_1 = A_2$, где A_1 – работа, которая совершается моментом сил, возникающим при отклонении от равновесного положения одной из сольватированных и ориентированных в поле иона молекул растворителя; A_2 – работа, которую совершит возвращающая сила F_2 , возникающая при деформации пружины Δl . Отклонение от равновесного положения одной из сольватированных молекул схематично изображено на рисунке 10.

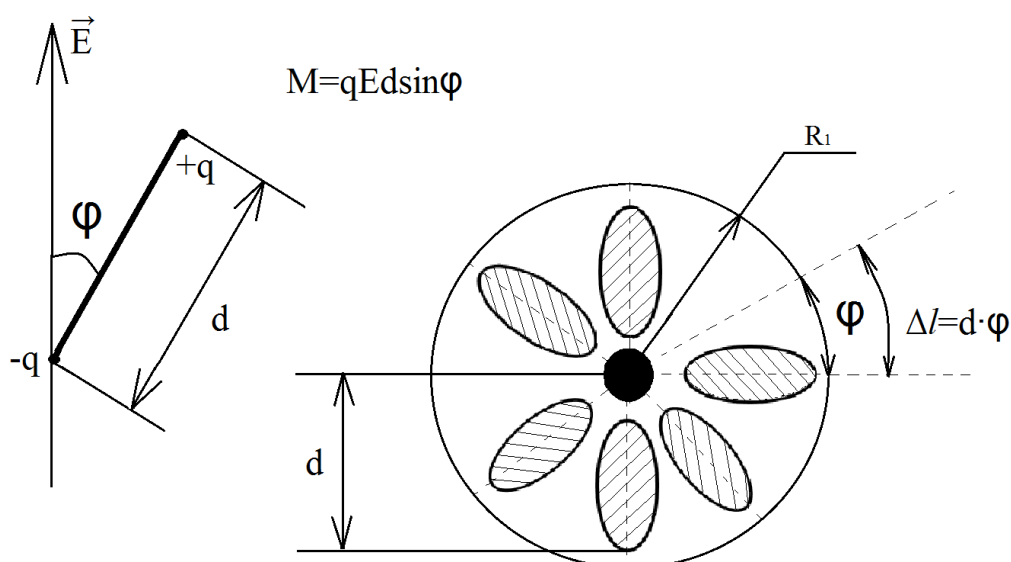


Рисунок 10. Возникновение момента сил при отклонении одной из молекул сольвента под действием поля

На рисунке представлен случай, когда вокруг иона с координационным числом, равным шести, расположено соответствующее число молекул сольвента в пределах первого радиуса сольватации. При деформации сольватной оболочки молекула растворителя отклоняется от первоначального положения на угол φ . Деформация создает момент сил $M = p \cdot (E \cdot \sin \varphi)$, где p – собственный дипольный момент частицы сольвента; E – напряженность поля, создаваемого ионом и действующего на расстоянии первого радиуса сольватации. Момент сил, возвращающих частицу сольвента в равновесное

положение, совершает работу $A_1 = M \cdot \varphi$. Сила F_2 , рассчитываемая как $F_2 = k \cdot \Delta l = k \cdot (d \cdot \varphi)$, совершает работу, равную $A_2 = F_2 \cdot d \cdot \varphi$, где d – длина образованного ионом и молекулами растворителя диполя. Значение коэффициента жесткости спиральной пружины для случая, когда растворителем является вода, можно рассчитать с помощью формулы:

$$k = \frac{pE}{d^2} \cdot \frac{\sin \varphi}{\varphi} \approx 6,33 \cdot 10^{-5} \frac{\sin \varphi}{\varphi}, \text{ Н/м.} \quad (2.3.6)$$

Решение уравнения (2.3.1) дает выражение для амплитуды вынужденных колебаний иона:

$$b = \frac{F}{m \sqrt{(\omega_0^2 - \gamma^2)^2 + 4\lambda^2 \gamma^2}}. \quad (2.3.7)$$

В отсутствии трения сольватированного иона о молекулы сольвента амплитуда вынужденных колебаний иона будет определять выражением:

$$b_1 = \frac{F}{m \sqrt{(\omega_0^2 - \gamma^2)^2}}. \quad (2.3.8)$$

Теперь можно определить коэффициент уменьшения амплитуды колебаний иона за счет трения:

$$k_f = (b_1 / b)^{-1} = \left(1 + \frac{4\lambda^2 \gamma^2}{(\omega_0^2 - \gamma^2)^2}\right)^{-1/2}. \quad (2.3.9)$$

Уравнение для колебаний сольватированного иона $\Delta(t)$ с учетом трения с молекулами сольвента запишется в виде:

$$\Delta(t) = k_f \left(\frac{3A}{8gq_{ion}} (\sin 2\gamma t - 2\sin \gamma t) + C \right)^{-1/3}, \quad (2.3.10)$$

где g – коэффициент пропорциональности в законе Кулона в системе физических величин СИ. Для случая, когда растворителем является вода, трение о молекулы растворителя сольватированного иона, радиус сольватной оболочки которого составляет 0,2 мкм, приводит к уменьшению амплитуды колебаний в 1400 раз, то есть $k_f \approx 0,71 \cdot 10^{-3}$.

Движение иона в растворе можно проиллюстрировать, используя «пиковые» точки, в которых отклонение максимально. Таким образом, учитывая только положение иона в моменты времени, равные периодам колебаний, можно построить зависимость вида $L(t)$ (рисунок 11) с учетом трения сольватированного иона о молекулы растворителя.

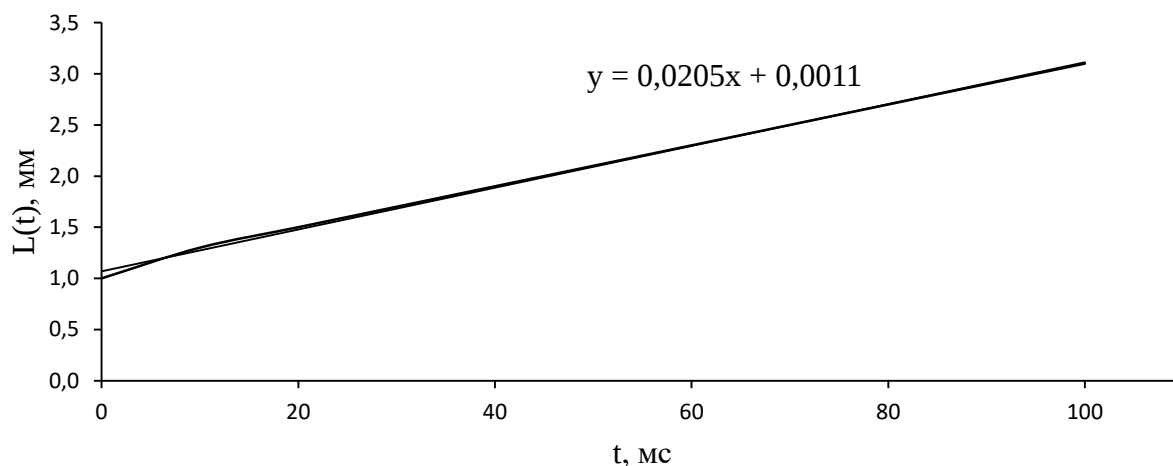


Рисунок 11. График зависимости смещений иона в процессе колебательно-поступательного движения в асимметричном электрическом поле

Как видно из графика, за время, равное 0,1 с. ион преодолел расстояние с начальной точки $a=1$ мм. до расстояния, равного 3,1 мм. Со средней скоростью 2,05 см/с. Таким образом, с помощью данной модели можно качественно оценить траекторию движения иона в растворе под действием внешнего асимметричного электрического поля. При этом данная модель не подходит для количественного описания: несмотря на учет трения иона о молекулы сольвента, значение скорости движения иона оказалось весьма большим и протекание процесса при таких скоростях не представляется возможным.

3 Экспериментальная часть

Блок-схема экспериментального комплекса отображена на рисунке 12. Сигналы, инициируемые генератором звуковых сигналов ГЗ-109 (1) подавались на предварительное усиление с помощью усилителя RUB 2260 (2), который имел собственный источник питания NWS-100-12 (3),

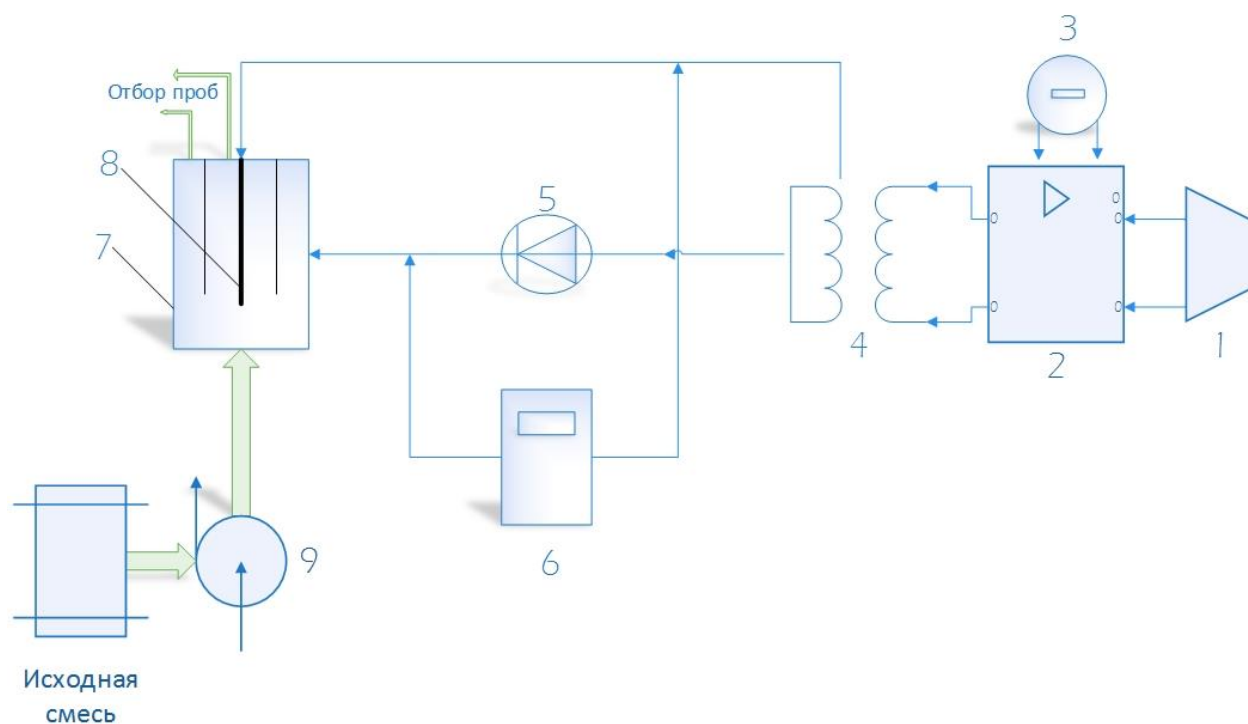


Рисунок 12. Блок-схема экспериментального комплекса.

Далее сигнал усиливался с помощью трансформатора (4) и проходил через устройство формирования сигнала асимметричной формы (5). Форму сигнала показывал осциллограф (6). Измененный сигнал подавался на центральный электрод (8) экспериментальной установки (7). Исходная смесь подавалась из емкости с раствором в нижнюю часть опытной установки с помощью перистальтического насоса (9). В качестве исходной смеси использовались растворы солей хлоридов кальция и магния. общий вид и конструкция экспериментального устройства представлены на рисунке 13.

В центре цилиндрической ячейки установлен потенциальный электрод (1), выполненный из стального прутка и герметично изолированный от общего

объема ячейки поливинилхлоридной трубкой. Заземленный электрод цилиндрической формы, также изготовленный из стали, изолирован от раствора полиэтиленовой пленкой. Весь рабочий объем ячейки разделен перфорированным цилиндром (5) на две зоны: внутреннюю и внешнюю, разделяя таким образом зоны обогащения и обеднения раствора целевыми компонентами.

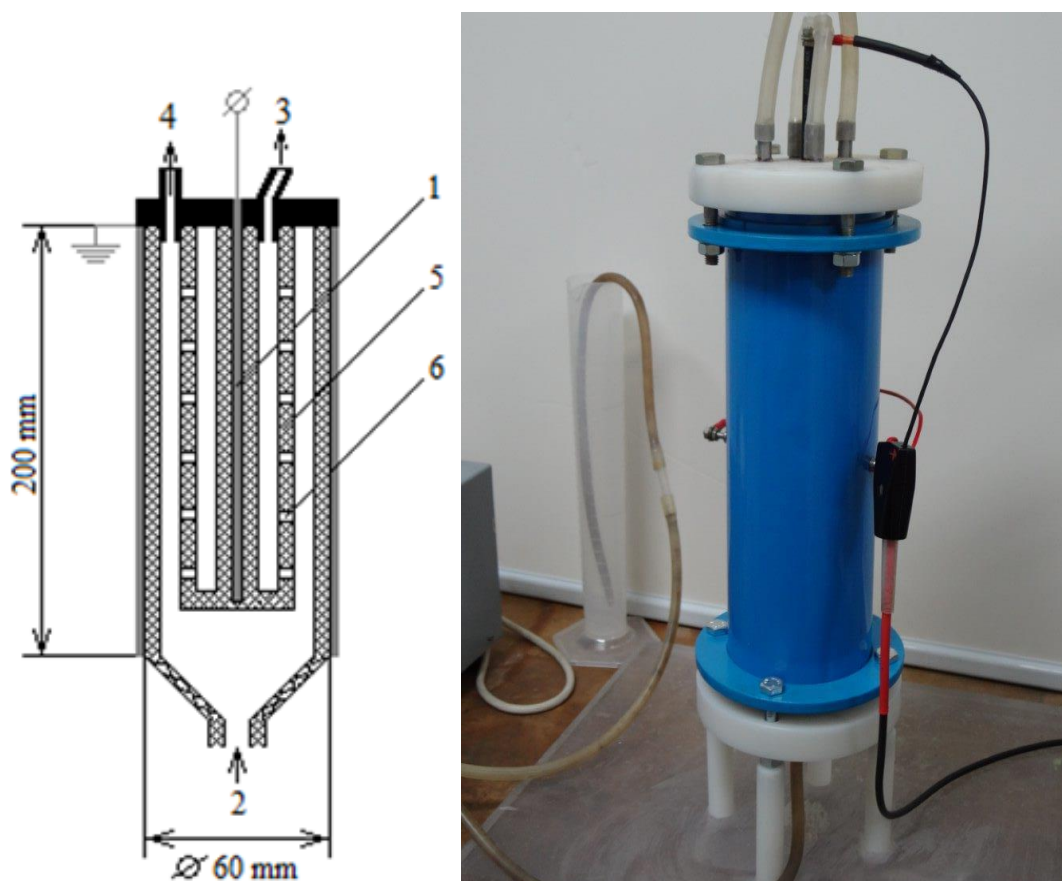


Рисунок 13. Фотография и схематическое изображение опытной установки во фронтальном разрезе

Перфорирование цилиндра (6), выполненное в виде продолговатых вертикальных отверстий по всей поверхности разделяющего цилиндра, выполнено для обеспечения свободного перемещения ионов между внутренней и наружной зонами. Рабочая смесь подавалась в нижнюю часть ячейки через штуцер (2) с одинаковой скоростью. Из двух частей ячейки пробы отбирались автономно с помощью штуцеров (3) и (4) и отводных шлангов с зажимами Гофмана, с помощью которых регулировался выходной

объем растворов. В эксперименте создавались условия для обеспечения ламинарного течения жидкости в ячейке с линейной скоростью раствора не более 4 см/мин, причем скорость движения во внутренней и внешней зонах отличалась на 4-7 % [18].

Пробы отбирались через определенные промежутки времени из двух зон ячейки. Для анализа проб в целях определения содержания ионов кальция и магния использовался атомно-эмиссионный спектрометр с индуктивной связанной плазмой iCAP 6300 Duo. Опыты проводились при наложении напряжения, равного 285 В, что соответствует напряженности поля в 86,4 В/см. Исходная концентрация ионов кальция и магния в растворе солей хлоридов данных металлов была равна 2,065 и 1,986 г/л. для кальция и магния, соответственно.

Статистическая обработка данных, полученных в результате анализа [18], говорит об ошибке измерений не более 0,014 от средних значений в относительных долях.

4 Результаты эксперимента

На рисунке 14 изображен характер изменения концентрации ионов кальция во внутренней и наружной зонах опытной ячейки в зависимости от частоты налагаемого поля (от 20 до 180 Гц).

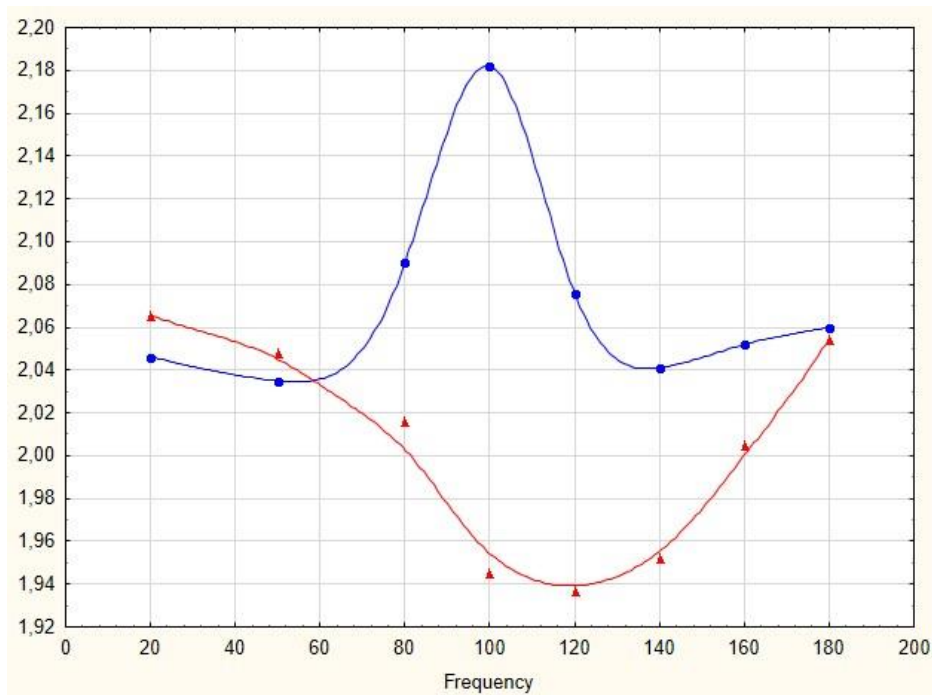


Рисунок 14. Влияние частоты налагаемого поля на содержание ионов кальция в рабочих зонах ячейки. Кружками обозначено содержание ионов во внутренней зоне, треугольниками – содержание ионов в наружной зоне

Исходя из данной зависимости можно сделать вывод, что в интервале частот от 80 до 120 Гц наблюдается отчетливо выраженное увеличение концентрации ионов кальция во внутренней зоне рабочей ячейки с соответствующим уменьшением концентрации во внешней зоне, что говорит о перераспределении концентрации данного иона между соответствующими зонами рабочего раствора. Таким образом, можно говорить о наличии эффекта разделения.

Ввиду свойства электронейтральности растворов электролитов, с увеличением концентрации положительных ионов кальция во внутренней зоне ячейки должно происходить соответствующее уменьшение концентрации

ионов магния в данной зоне. Вместе с этим при уменьшении концентрации ионов кальция в наружной зоне, также должно происходить увеличение концентрации ионов магния в этой зоне. То есть изменение в объеме электрического заряда приводит к компенсации данного заряда путем прихода в этот объем соответствующих ионов. Это явление можно определить, как электромиграционный процесс, и как обменный процесс между ионами разных элементов. Таким образом, с учетом перераспределения зарядов, должно наблюдаться соответствующее изменение содержания магния во внутренней и наружной зонах ячейки (рисунок 15).

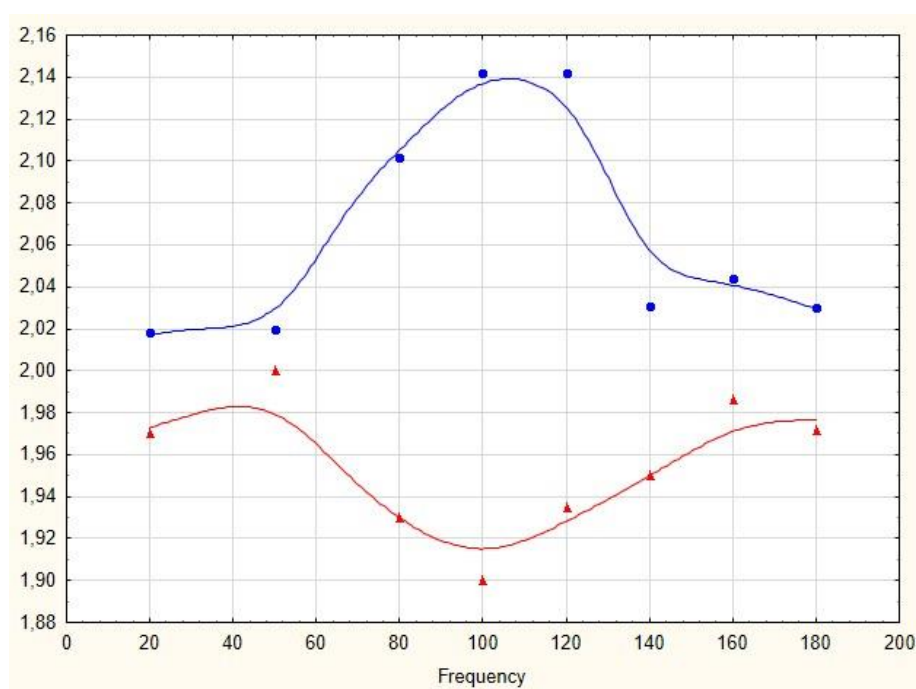


Рисунок 15. Влияние частоты налагаемого поля на содержание ионов магния в рабочих зонах ячейки. Кружками обозначено содержание ионов в наружной зоне, треугольниками – содержание ионов во внутренней зоне

Из рисунка видно, что изменение содержания ионов кальция в рабочих зонах раствора приводит к соответствующему изменению содержания ионов магния в данных зонах, причем данная зависимость носит ярко выраженный обратный характер.

Исходя из рисунков 14 и 15, можно сделать вывод, зависимость концентрации ионов кальция и магния от частоты налагаемого поля носит

резонансный характер, то есть эффект можно наблюдать только в определенном узком интервале частот, характерным для каждого элемента.

Это можно объяснить различным значением длины связи сольватной оболочки с центральным ионом. Радиус внешней электронной оболочки у иона магния меньше, чем у иона кальция, поэтому кулоновское взаимодействие иона магния с молекулами воды, входящими в состав сольватных оболочек, образует более короткую связь, что соответствует большей собственной частоте связи. Катионы оказывают лишь координирующее влияние на молекулы растворителя в первой и второй сольватных сферах, а количество молекул растворителя в сольватной оболочке определяется радиусом экранирования заряда катиона совокупным зарядом поляризованных молекул растворителя.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Цель раздела – комплексное описание и анализ финансово-экономических аспектов выполненной работы. Необходимо оценить полные затраты на исследование (проект), а также дать приближенную экономическую оценку результатов ее внедрения. Это в свою очередь позволит с помощью традиционных показателей эффективности инвестиций оценить экономическую целесообразность осуществления работы.

5.1 Организация и планирование работ

При организации процесса реализации конкретного проекта необходимо рационально планировать занятость каждого из его участников и сроки проведения отдельных работ.

В данном пункте составляется полный перечень проводимых работ, определяются их исполнители и рациональная продолжительность. Наглядным результатом планирования работ является сетевой, либо линейный график реализации проекта. Так как число исполнителей редко превышает двух (степень распараллеливания всего комплекса работ незначительна) в большинстве случаев предпочтительным является линейный график. Для его построения хронологически упорядоченные вышеуказанные данные должны быть сведены в таблицу 3.

Таблица 3. Перечень работ

Этап работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР, И	НР – 100% И – 10%

Этап работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	НР – 30% И – 100%
Разработка календарного плана	НР, И	НР – 100% И – 10%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 100%
Разработка модели	НР, И	НР – 100% И – 70%
Определение адекватности модели	НР, И	НР – 100% И – 80%
Изучение результатов	И	И – 100%
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	И – 100%
Оформление графического материала	И	И – 100%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

5.1.1 Продолжительность этапов работ

Расчет продолжительности этапов работ может осуществляться двумя методами:

- технико-экономическим;
- опытно-статистическим.

Первый применяется в случаях наличия достаточно развитой нормативной базы трудоемкости планируемых процессов, что в свою очередь обусловлено их высокой повторяемостью в устойчивой обстановке. Так как исполнитель работы зачастую не располагает соответствующими нормативами, то используется опытно-статистический метод, который реализуется двумя способами:

- аналоговый;
- экспертный.

Аналоговый способ привлекает внешней простотой и околонулевыми затратами, но возможен только при наличии в поле зрения исполнителя НИР не устаревшего аналога, т.е. проекта в целом или хотя бы его фрагмента, который

по всем значимым параметрам идентичен выполняемой НИР. В большинстве случаев он может применяться только локально – для отдельных элементов.

Экспертный способ используется при отсутствии вышеуказанных информационных ресурсов и предполагает генерацию необходимых количественных оценок специалистами конкретной предметной области, опирающимися на их профессиональный опыт и эрудицию. Для определения вероятных значений продолжительности работ $t_{ОЖ}$ применяется по усмотрению исполнителя одна из двух формул.

$$t_{ОЖ} = \frac{3t_{\min} + 2t_{\max}}{5} \quad (6.1.1.1)$$

$$t_{ОЖ} = \frac{t_{\min} + 4t_{\text{prob}} + t_{\max}}{6} \quad (6.1.1.2)$$

где $t_{\min}$ – минимальная продолжительность работы, дн.;

$t_{\max}$ – максимальная продолжительность работы, дн.;

t_{prob} – наиболее вероятная продолжительность работы, дн.

Вторая формула дает более надежные оценки, но предполагает большую «нагрузку» на экспертов.

Для выполнения перечисленных в таблице 3 работ требуются специалисты:

- инженер – в его роли действует исполнитель ВКР;
- научный руководитель.

Для построения линейного графика необходимо рассчитать длительность этапов в рабочих днях, а затем перевести ее в календарные дни.

Расчет продолжительности выполнения каждого этапа в рабочих днях:

$$T_{\text{РД}} = \frac{t_{ОЖ}}{K_{\text{ВН}}} \cdot K_{\text{Д}} \quad (6.1.1.3)$$

где $K_{\text{ВН}}$ – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение предварительно определенных длительностей;

$K_{\text{Д}}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ.

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{\text{к}} = \frac{T_{\text{КАЛ}}}{T_{\text{КАЛ}} - T_{\text{ВД}} - T_{\text{ПД}}} \quad (6.1.1.4)$$

где $T_{\text{КАЛ}}$ – календарные дни ($T_{\text{КАЛ}} = 365$);

$T_{\text{ВД}}$ – выходные дни ($T_{\text{ВД}} = 52$);

$T_{\text{ПД}}$ – праздничные дни ($T_{\text{ПД}} = 15$).

В таблице 4 приведено определение продолжительности этапов работ и их трудоемкости по исполнителям, занятым на каждом этапе. В столбцах 3 – 5 реализован экспертный способ по формуле (6.1.1.1), при использовании формулы (6.1.1.2) необходимо вставить в таблицу дополнительный столбец для $t_{\text{проб}}$. Столбцы 6 и 7 содержат величины трудоемкости этапа для каждого из двух участников проекта, научного руководителя и инженера, с учетом коэффициента $K_{\text{д}} = 1,1$.

Каждое из них в отдельности не может превышать соответствующее значение $t_{\text{ож}} \cdot K_{\text{д}}$. Столбцы 8 и 9 – трудоемкости, выраженные в календарных днях путем дополнительного умножения на $T_{\text{к}}=1,225$. Итог по столбцу 5 дает общую ожидаемую продолжительность работы над проектом в рабочих днях, итоги по столбцам 8 и 9 – общие трудоемкости для каждого из участников проекта. Величины трудоемкости этапов по исполнителям ТКД, данные столбцов 8 и 9 кроме итогов, позволяют построить линейный график осуществления проекта, представленного в таблице 5.

Таблица 4. Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка задачи	НР	1	2	1,40	1,54	–	1,89	–
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	НР, И	2	3	2,40	2,64	0,26	3,23	0,32
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	4	5	4,40	1,45	4,84	1,78	5,93
Разработка календарного плана	НР, И	1	2	1,40	1,54	0,15	1,89	0,19
Обсуждение литературы	НР, И	1	2	1,40	0,46	1,54	0,57	1,89
Разработка модели	НР, И	5	6	5,40	5,94	4,16	7,28	5,09
Определение адекватности модели	НР, И	7	8	7,40	8,14	6,51	9,97	7,98
Изучение результатов	И	3	4	3,40	–	3,74	–	4,58
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	3	4	3,40	–	3,74	–	4,58
Оформление графического материала	И	1	2	1,40	–	1,54	–	1,89
Подведение итогов	НР, И	1	2	1,40	0,92	1,54	1,13	1,89
Итого:				33,40	22,64	28,03	27,73	34,33

Таблица 5. Линейный график работы

Этап	НР	И	4	8	12	16	20	24	28	32	36	40	44	48
1	1,89	0,00												
2	3,23	0,32	 											
3	1,78	5,93		 										
4	1,89	0,19				 								
5	0,57	1,89				 								
6	7,28	5,09					 							
7	9,97	7,98						 						
8	0,00	4,58												
9	0,00	4,58												
10	0,00	1,89												
11	1,13	1,89											 	

НР – ; И – 

5.1.2 Расчет накопления готовности проекта

Цель данного пункта – оценка текущих состояний (результатов) работы над проектом. Величина накопления готовности работы показывает, на сколько процентов по окончании текущего (i -го) этапа выполнен общий объем работ по проекту в целом.

Введем обозначения:

- $TP_{\text{общ}}$ – общая трудоемкость проекта;
- TP_i (TP_k) – трудоемкость i -го (k -го) этапа проекта, $i = \overline{1, I}$;
- TP_i^H – накопленная трудоемкость i -го этапа проекта по его завершении;
- TP_{ij} (TP_{kj}) – трудоемкость работ, выполняемых j -м участником на i -м этапе, здесь $j = \overline{1, m}$ – индекс исполнителя, в нашем примере $m = 2$.

Степень готовности определяется формулой (6.1.2.1):

$$CG_i = \frac{TP_i^H}{TP_{\text{общ}}} = \frac{\sum_{k=1}^i TP_k}{TP_{\text{общ}}} = \frac{\sum_{k=1}^i \sum_{j=1}^m TP_{km}}{\sum_{k=1}^I \sum_{j=1}^m TP_{km}} \quad (6.1.2.1)$$

Применительно к таблице 5 величины TP_{ij} (TP_{kj}) находятся в столбцах (6, $j = 1$) и (7, $j = 2$). $TP_{\text{общ}}$ равна сумме чисел из итоговых клеток этих столбцов. Расчет TP_i (%) и CG_i (%) на основе этих данных приведен в таблице 6.

Таблице 6 – Нарастание технической готовности работы и удельный вес каждого этапа

Этап	TP_i , %	CG_i , %
Постановка задачи	4,19	4,19
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	7,19	11,38
Подбор и изучение материалов по тематике	13,17	24,55
Разработка календарного плана	4,19	28,74

Этап	ТР _i , %	СГ _i , %
Обсуждение литературы	4,19	32,93
Разработка модели	16,17	49,10
Определение адекватности модели	22,16	71,26
Изучение результатов	10,18	81,44
Оформление расчетно-пояснительной записки	10,18	91,62
Оформление графического материала	4,19	95,81
Подведение итогов	4,19	100,00

5.2 Расчет сметы на выполнение проекта

В состав затрат на создание проекта включается величина всех расходов, необходимых для реализации комплекса работ, составляющих содержание данной разработки. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат:

- материалы и покупные изделия;
- заработная плата;
- социальный налог;
- расходы на электроэнергию (без освещения);
- амортизационные отчисления;
- командировочные расходы;
- оплата услуг связи;
- арендная плата за пользование имуществом;
- прочие услуги (сторонних организаций);
- прочие (накладные расходы) расходы.

5.2.1 Расчет затрат на материалы

К данной статье расходов относится стоимость материалов, покупных изделий, полуфабрикатов и других материальных ценностей, расходуемых непосредственно в процессе выполнения работ над объектом

проектирования. Сюда же относятся специально приобретенное оборудование, инструменты и прочие объекты, относимые к основным средствам, стоимостью до 40 000 руб. включительно. Цена материальных ресурсов определяется по соответствующим ценникам или договорам поставки. Кроме того, статья включает так называемые транспортно-заготовительные расходы, связанные с транспортировкой от поставщика к потребителю, хранением и прочими процессами, обеспечивающими движение (доставку) материальных ресурсов от поставщиков к потребителю. Сюда же включаются расходы на совершение сделки купли-продажи (т.н. транзакции). Приблизительно они оцениваются в процентах к отпускной цене закупаемых материалов, как правило, это 5 – 20 %. Исполнитель работы самостоятельно выбирает их величину в границах, представленных в таблице 7.

Таблица 7. Расчет затрат на материалы

Наименование материалов	Цена за ед., руб.	Кол-во	Сумма, руб.
Бумага для принтера формата А4	250	1 уп.	250
Картридж для принтера	1550	1 шт.	1550
Анализ	5000	1 шт.	5000
Итого:			6800

Допустим, что ТЗР составляют 5 % от отпускной цены материалов, тогда расходы на материалы с учетом ТЗР равны $C_{\text{мат}} = 6800 \cdot 1,05 = 7140$ руб.

5.2.2 Расчет заработной платы

Данная статья расходов включает заработную плату научного руководителя и инженера, в его роли выступает исполнитель проекта, а также премии, входящие в фонд заработной платы. Расчет основной заработной платы выполняется на основе трудоемкости выполнения каждого

этапа и величины месячного оклада исполнителя. Среднедневная тарифная заработная плата ($ЗП_{\text{дн-т}}$) рассчитывается по формуле 6:

$$ЗП_{\text{дн-т}} = \frac{МО}{25,083} \quad (6.2.2.1)$$

где 25,083 – среднее количество рабочих дней в месяце при шестидневной рабочей неделе.

Расчет затрат на полную заработную плату приведены в таблице 8. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 4. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов: $K_{\text{ПР}} = 1,1$; $K_{\text{доп.зп}} = 1,188$; $K_{\text{Р}} = 1,3$. Таким образом, для перехода от тарифной суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку необходимо первую умножить на интегральный коэффициент:

$$K_{\text{И}} = K_{\text{ПР}} \cdot K_{\text{доп.зп}} \cdot K_{\text{Р}}; \quad (6.2.2.2)$$

$$K_{\text{И}} = 1,1 \cdot 1,188 \cdot 1,3 = 1,699.$$

Таблица 8. Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад руб./мес.	Среднедневная ставка руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	$K_{\text{И}}$	Фон з/п, руб.
НР	33664	1342,10	23	1,699	52445,41
И	15470	616,75	29	1,699	30388,01
Итого:					82833,41

5.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту:

$$C_{\text{соц}} = C_{\text{зп}} \cdot 0,3; \quad (6.2.3.1)$$

$$C_{\text{соц}} = 82833,41 \cdot 0,3 = 24850,02.$$

5.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

Данный вид расходов включает в себя затраты на электроэнергию, потраченную в ходе выполнения проекта на работу используемого оборудования, рассчитываемые по формуле:

$$C_{\text{эл.об}} = P_{\text{об}} \cdot t_{\text{об}} \cdot C_{\text{э}}, \quad (6.2.4.1)$$

где $P_{\text{об}}$ – мощность, потребляемая оборудованием, кВт;

$C_{\text{э}}$ – тариф на 1 кВт·час;

$t_{\text{об}}$ – время работы оборудования, час.

Для ТПУ $C_{\text{э}} = 5,748$ руб./кВт·час (с НДС).

Время работы оборудования вычисляется на основе итоговых данных таблицы 4 для инженера ($T_{\text{рд}}$) из расчета, что продолжительность рабочего дня равна 8 часов.

$$t_{\text{об}} = T_{\text{рд}} \cdot K_t, \quad (6.2.4.2)$$

где $K_t \leq 1$ – коэффициент использования оборудования по времени, равный отношению времени его работы в процессе выполнения проекта к $T_{\text{рд}}$, определяется исполнителем самостоятельно.

В ряде случаев возможно определение $t_{\text{об}}$ путем прямого учета, особенно при ограниченном использовании соответствующего оборудования.

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле:

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном}} \cdot K_c, \quad (6.2.4.3)$$

где $P_{\text{ном}}$ – номинальная мощность оборудования, кВт;

$K_c \leq 1$ – коэффициент загрузки, зависящий от средней степени использования номинальной мощности.

Для технологического оборудования малой мощности $K_c = 1$.

Расчет затрат на электроэнергию для технологических целей приведен в таблице 9.

Таблица 9 – Затраты на электроэнергию технологическую

Наименование оборудования	Время работы оборудования $t_{\text{ОБ}}$, час	Потребляемая мощность $P_{\text{ОБ}}$, кВт	Затраты $C_{\text{ЭЛ.ОБ}}$, руб.
Персональный компьютер	224	0,3	386,3
Струйный принтер	2	0,1	1,15
Итого:			387,45

5.2.5 Расчет амортизационных расходов

В данной статье представлен расчёт амортизации используемого оборудования за время выполнения проекта по следующей формуле:

$$C_{\text{АМ}} = \frac{H_{\text{А}} \cdot t_{\text{ОБ}} \cdot C_{\text{ОБ}} \cdot n}{F_{\text{Д}}}, \quad (6.2.5.1)$$

где $H_{\text{А}}$ – годовая норма амортизации единицы оборудования;

$C_{\text{ОБ}}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР;

$F_{\text{Д}}$ – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования, берется из специальных справочников или фактического режима его использования в текущем календарном году;

$t_{\text{ОБ}}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, учитывается исполнителем проекта;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Например, для ПК в 2019 г., при 298 рабочих днях и 8-ми часовом рабочем дне, $F_{\text{Д}}$ равен:

$$F_{\text{Д}} = 298 \cdot 8 = 2384.$$

При использовании нескольких типов оборудования расчет по формуле делается соответствующее число раз, затем результаты суммируются.

$H_{\text{А}}$ определяется как величина обратная СА, в данном случае это:

$$H_A = \frac{1}{2,5} = 0,4$$

Зная значения всех коэффициентов, можно рассчитать:

$$C_{AM} = \frac{0,4 \cdot 224 \cdot 60000 \cdot 1}{2384} = 2255.$$

5.2.6 Расчет прочих расходов

В статье «Прочие расходы» отражены расходы на выполнение проекта, которые не учтены в предыдущих статьях, их следует принять равными 10% от суммы всех предыдущих расходов:

$$C_{ПРОЧ} = (C_{МАТ} + C_{ЗП} + C_{СОЦ} + C_{ЭЛ.ОБ} + C_{АМ}) \cdot 0,1. \quad (6.2.6.1)$$

Прочие расходы в нашем случае:

$$C_{ПРОЧ} = (6800 + 82833,41 + 24850,02 + 387,45 + 2255) \cdot 0,1 = 11712,59.$$

5.2.7 Расчет общей себестоимости разработки

Проведя расчет по всем статьям сметы затрат на разработку, можно определить общую себестоимость проекта (таблица 10).

Таблица 10 – Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{МАТ}$	6800
Основная заработная плата	$C_{ЗП}$	82833,41
Отчисления в социальные фонды	$C_{СОЦ}$	24850,02
Расходы на электроэнергию	$C_{ЭЛ.ОБ}$	415,01
Амортизационные отчисления	$C_{АМ}$	2255
Прочие расходы	$C_{ПРОЧ}$	11712,59
Итого:		128866,03

Таким образом, затраты на разработку составили $C = 128866,03$ руб.

5.2.8 Расчет прибыли

Ввиду отсутствия данных, прибыль G рассчитана как 20 % от полной себестоимости проекта:

$$G = C \cdot 0,2; \quad (6.2.8.1)$$

$$G = 128866,03 \cdot 0,2 = 25773,21.$$

5.2.9 Расчет НДС

НДС составляет 20% от суммы затрат на разработку и прибыли:

$$НДС = (G + C) \cdot 0,2; \quad (6.2.9.1)$$

$$НДС = (128866,03 + 25773,21) \cdot 0,2 = 3927,85.$$

5.2.10 Цена разработки

Цена равна сумме полной себестоимости, прибыли и НДС:

$$C_{НИР} = C + G + НДС; \quad (6.2.10.1)$$

$$C_{НИР} = 128866,03 + 25773,21 + 3927,85 = 158567,09.$$

5.3 Оценка экономической эффективности проекта

Так как разработка модели траектории движения ионов в водном растворе носит чисто исследовательский характер, в данном случае оценка экономической эффективности невозможна.

6. Социальная ответственность

В современных условиях одним из основных направлений коренного улучшения всей профилактической работы по снижению производственного травматизма и профессиональной заболеваемости является повсеместное внедрение комплексной системы управления охраной труда, то есть путем объединения разрозненных мероприятий в единую систему целенаправленных действий на всех уровнях и стадиях производственного процесса.

Охрана труда – это система законодательных, социально-экономических, организационных, технологических, гигиенических и лечебно-профилактических мероприятий и средств, обеспечивающих безопасность, сохранение здоровья и работоспособности человека в процессе труда [19].

Правила по охране труда и техники безопасности вводятся в целях предупреждения несчастных случаев, обеспечения безопасных условий труда работающих и являются обязательными для исполнения рабочими, руководящими, инженерно-техническими работниками.

Опасным производственным фактором, согласно [19], называется такой производственный фактор, воздействие которого в определенных условиях приводят к травме или другому внезапному, резкому ухудшению здоровья.

Вредным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого на работающего, в определенных условиях, приводит к заболеванию или снижению трудоспособности.

6.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Производственные условия на рабочем месте характеризуются наличием опасных и вредных факторов, которые классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические, психофизиологические. Основные элементы производственного процесса, формирующие опасные и вредные факторы представлены в таблице 1.

Таблица 11. Основные элементы производственного процесса, формирующие опасные и вредные факторы

Наименование видов работ и параметров производственного процесса	Факторы ГОСТ 12.03.003-74 ССБТ		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
Работа на ПЭВМ, Отделение ЯТЦ НИ ТПУ	—	Электрический ток	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность
	Воздействие радиации (ВЧ, УВЧ, СВЧ и так далее)	—	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы. «Гигиенические требования к ПЭВМ и организации работы»
	—	Пожарная безопасность	Пожарная безопасность. Общие требования. ГОСТ 12.1.004-91

На студента, работающего на компьютере, воздействуют следующие факторы:

— физические: температура и влажность воздуха; шум; статическое электричество; электромагнитное поле низкой чистоты; освещённость; наличие излучения;

– психофизиологические.

Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы, делятся на: физические перегрузки (статические, динамические) и нервно-психические перегрузки (умственное перенапряжение, монотонность труда, эмоциональные перегрузки).

6.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ

6.2.1 Организационные мероприятия

Весь персонал обязан знать и строго соблюдать правила техники безопасности. Обучение персонала технике безопасности и производственной санитарии состоит из вводного инструктажа и инструктажа непосредственно на рабочем месте ответственным лицом.

Проверка знаний правил техники безопасности проводится квалификационной комиссией или лицом ответственным за рабочее место после обучения на рабочем месте. После чего сотруднику присваивается соответствующая его знаниям и опыту работы квалификационная группа по технике безопасности и выдается удостоверение специального образца.

Лица, обслуживающие электроустановки не должны иметь увечий и болезней, мешающих производственной работе. Состояние здоровья устанавливается медицинским освидетельствованием перед устройством на работу.

6.2.2 Технические мероприятия

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно

располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как показано на рисунке 16.

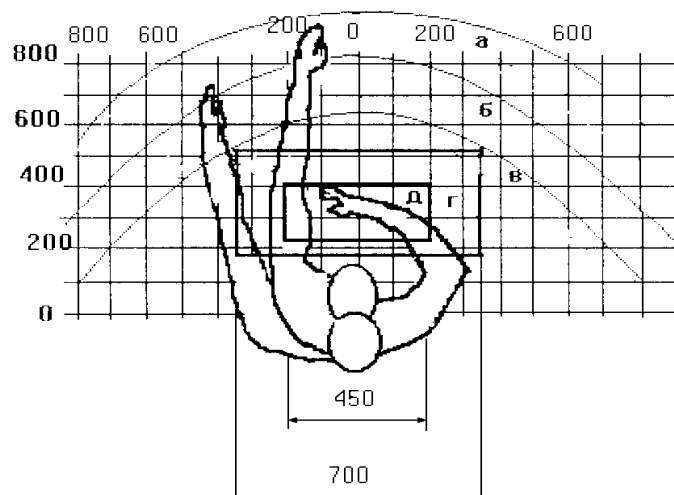


Рисунок 16 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости
(а – зона максимальной досягаемости рук; б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке; в – зона легкой досягаемости ладони; г – оптимальное пространство для грубой ручной работы; д – оптимальное пространство для тонкой ручной работы)

Оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости рук:

- дисплей размещается в зоне а (в центре);
- клавиатура – в зоне г/д;
- системный блок размещается в зоне б (слева);
- принтер находится в зоне а (справа);
- документация: в зоне легкой досягаемости ладони – в (слева) – литература и документация, необходимая при работе; в выдвижных ящиках стола – литература, не используемая постоянно.

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования.

Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680 - 800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается

клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной не менее 500 мм, глубиной на уровне колен не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420 - 550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглублённым передним краем.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз студента на расстоянии 500 - 600 мм. Согласно нормам, угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45° к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30°. Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране.

Должна предусматриваться возможность регулирования экрана:

- по высоте +3 см;
- по наклону от 10 до 20 градусов относительно вертикали;
- в левом и правом направлениях.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100 - 300 мм от края. Нормальным положением клавиатуры является её размещение на уровне локтя оператора с углом наклона к горизонтальной плоскости 15°. Более удобно работать с клавишами, имеющими вогнутую поверхность, четырёхугольную форму с закруглёнными углами. Конструкция клавиши должна обеспечивать оператору ощущение щелчка. Цвет клавиш должен контрастировать с цветом панели.

При однообразной умственной работе, требующей значительного нервного напряжения и большого сосредоточения, рекомендуется выбирать неяркие, малоконтрастные цветочные оттенки, которые не рассеивают

внимание (малонасыщенные оттенки холодного зеленого или голубого цветов). При работе, требующей интенсивной умственной или физической напряженности, рекомендуются оттенки тёплых тонов, которые возбуждают активность человека.

6.3 Условия безопасной работы

Основные параметры, характеризующие условия труда – это микроклимат, шум, вибрация, электромагнитное поле, излучение, освещённость.

Воздух рабочей зоны (микроклимат) производственных помещений определяют следующие параметры: температура, относительная влажность, скорость движения воздуха. Оптимальные и допустимые значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии с [20] приведены в таблице 2.

Таблица 12. Оптимальные и допустимые параметры микроклимата

Период года	Температура, °C	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный и переходный	23-25	40-60	0,1
Теплый	23-25	40	0,1

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. В помещение должны подаваться следующие объёмы наружного воздуха: при объёме помещения до 20 м³ на человека – не менее 30 м³ в час на человека;

при объеме помещения более 40 м³ на человека и отсутствии выделения вредных веществ допускается естественная вентиляция.

Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1 м/с, температура летом – 20-25°С, зимой – 13-15 °С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери. Основной недостаток такой вентиляции в том, что приточный воздух поступает в помещение без предварительной очистки и нагревания.

Шум и вибрация ухудшают условия труда, оказывают вредное воздействие на организм человека, а именно, на органы слуха и на весь организм через центральную нервную систему. В результате этого ослабляется внимание, ухудшается память, снижается реакция, увеличивается число ошибок при работе. Шум может создаваться работающим оборудованием, установками кондиционирования воздуха, осветительными приборами дневного света, а также проникать извне. При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте не должен превышать 50 дБ.

Экран и системные блоки производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видео-кабеля. Согласно [20], напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна быть не более:

- в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц – 25 В/м;
- в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц – 2,5 В/м.

Плотность магнитного потока должна быть не более:

- в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц – 250 нТл;
- в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц – 25 нТл.

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);
- применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

При работе с компьютером источником ионизирующего излучения является дисплей. Под влиянием ионизирующего излучения в организме может происходить нарушение нормальной свертываемости крови, увеличение хрупкости кровеносных сосудов, снижение иммунитета и др. Доза облучения при расстоянии до дисплея 20 см составляет 50 мкбэр/час. По нормам [20] конструкция ЭВМ должна обеспечивать мощность экспозиционной дозы рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 5 см от экрана не более 100 мкР/час.

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

6.4 Электробезопасность

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ЭВМ в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75 %), высокой температуры (более 35 °C), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землей металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования. Оператор ЭВМ работает с электроприборами: компьютером (дисплей, системный блок и т.д.) и периферийными устройствами. Существует опасность поражения электрическим током в следующих случаях:

- при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта ЭВМ;
- при прикосновении к нетокведущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей ЭВМ);
- при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки.

Мероприятия по обеспечению электробезопасности электроустановок:

- отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы;
- вывешивание плакатов, указывающих место работы;
- заземление корпусов всех установок через нулевой провод;
- покрытие металлических поверхностей инструментов надёжной изоляцией;
- недоступность токоведущих частей аппаратуры (заклучение в корпуса электропоражающих элементов, токоведущих частей).

6.5 Пожарная и взрывная безопасность

Согласно [21], зависимости от характеристики используемых в производстве веществ и их количества, по пожарной и взрывной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г, Д. Так как помещение по степени пожаровзрывоопасности относится к категории В, т.е. к помещениям с твердыми сгорающими веществами, необходимо предусмотреть ряд профилактических мероприятий.

Возможные причины загорания:

- неисправность токоведущих частей установок;

- работа с открытой электроаппаратурой;
- короткие замыкания в блоке питания;
- несоблюдение правил пожарной безопасности;
- наличие горючих компонентов: документы, двери, столы, изоляция кабелей и т.п.

Мероприятия по пожарной профилактике подразделяются на: организационные, технические, эксплуатационные и режимные.

Организационные мероприятия предусматривают правильную эксплуатацию оборудования, правильное содержание зданий и территорий, противопожарный инструктаж рабочих и служащих, обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности, издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации.

К техническим мероприятиям относятся: соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения, правильное размещение оборудования.

К режимным мероприятиям относятся, установление правил организации работ, и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара от коротких замыканий, перегрузок и т.д., необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- исключение образования горючей среды (герметизация оборудования, контроль воздушной среды, рабочая и аварийная вентиляция);
- применение при строительстве и отделке зданий негорючих или трудно сгораемых материалов;
- правильная эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электрического питания, контроль нагрева оборудования);
- правильное содержание зданий и территорий (исключение образования источника воспламенения – предупреждение самовозгорания веществ, ограничение огневых работ);

- обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;
- издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;
- соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения;
- правильное размещение оборудования;
- своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

При возникновении аварийной ситуации необходимо:

- сообщить руководству (дежурному);
- позвонить в аварийную службу или МЧС – тел. 112;
- принять меры по ликвидации аварии в соответствии с инструкцией.

Заключение

Выполненные эксперименты доказывают возможность использования ранее обнаруженного явления электроиндуцированного селективного дрейфа сольватированных ионов в растворах солей под действием асимметричного электрического поля для организации технологического процесса обогащения растворов по целевому металлу.

Можно сказать, что полученные выражения для определения колебаний иона в процессе селективного дрейфа и построенные с помощью полученного выражения траектория движения адекватно описывают процесс, но только на качественном уровне, то есть картину процесса, получаемую с помощью данной модели, можно использовать для дальнейшего изучения данного явления. Но при этом данная математическая модель не подходит для количественного описания явления электроиндуцированного дрейфа ионов в растворах полярных диэлектриков, так как полученное на основе данной модели значение скорости, проиллюстрированное на Рисунке 11, во много раз превосходит наблюдаемые в ходе эксперимента значения скорости селективного дрейфа.

Следует понимать, что на характер, траекторию и скорость движения иона в процессе электроиндуцированного дрейфа, вызванного внешним асимметричным переменным электрическим полем, влияет большое количество факторов. Как было сказано выше, наибольшее влияние на процесс оказывает хаотическое тепловое движение иона и частиц вокруг него, ввиду чего направленность движения иона может беспорядочно изменяться. Главным образом, влияние хаотического движения частиц на процесс селективного дрейфа можно определить отношением напряженности поля, действующего на раствор, и температурой этого раствора: чем больше значение E/T , тем менее выраженным должно оказаться действие беспорядочного движения.

Значительное влияние на характер поведения ионов также оказывает диффузия частиц в растворе, тепловая конвекция и при этом следует отметить такие важные параметры, как частота поля, коэффициент асимметрии, длина связи в поляризованном аквакомплексе, отношение масс положительной и отрицательной частей диполя, масса всего аквакомплекса, которые имеют большое значение при расчете траекторий движений частиц.

Список использованных источников

1. Abdel Rahman R O, Ibrahim H A and Hung Y-T 2011 Liquid radioactive wastes treatment: a review Water 3 551 doi:10.3390/w3020551.
2. Hofer T S, Tran H T, Schwenk C F and Rode B M 2004 Characterization of dynamics and reactivities of solvated ions by ab initio simulations. J. Comput. Chem. 25 211 doi:10.1002/jcc.10374.
3. Свэн Ш. Электрохимические методы получения органических соединений – М.: Иностранная литература, 1951. – 62 с.
4. Фиошин М.Я., Павлов В.Н Электролиз в неорганической химии – М.: Наука, 1976. – 104 с.
5. Вильсон Дж. Деминерализация методом электродиализа – М.: Госатомиздат, 1963. – 351 с.
6. Шапошник В.А. Мембранные методы разделения смесей веществ. Соросовский Образовательный Журнал № 9, 1999 – с 27-32.
7. Гребенюк В.Д. Электродиализ. – Киев: Техніка, 1976. – 160 с.
8. Шапошник В.А. Кинетика электродиализа. – Воронеж: ВГУ, 1989. – 175 с.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Т.1. Механика. – М.: Наука, 1988. – 216 с.
10. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике; Вычислительный эксперимент. – М.: Наука, 1982. – 391 с.
11. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массопереноса – М.: Наука, 1984. – 288с.
12. Казарян М.А., Шаманин И.В., Долгополов С.Ю., Дьяченко А.Н., Лобанов А.Н., Муравьев Э.Н., Ломов И.В. Электро- и магнитоиндуцированный перенос сольватированных ионов в изолированном растворе соли в полярном диэлектрике//Теоретические основы химической технологии. – 2010. – Т. 44. – № 1. – С. 1-9.

13. Фейнман Р.Ф. Фейнмановские лекции по физике: пер. с англ. / Р. Фейнман Ф., Лейтон Р., Сэндс М.. – 3-е изд., перераб. – М.: Мир, 1976-1978.
14. Парселл Э. Берклеевский курс физики: Пер. с англ.: В 5-ти т. – 3-е изд., испр. Т. 2: Электричество и магнетизм. – М.: Наука, 1983
15. Казарян М.А., Шаманин И.В., Ломов И.В. и др. Электро- и магнитоиндуцированный перенос сольватированных ионов в изолированном растворе соли в полярном диэлектрике // Теоретические основы химической технологии, 2010. Т. 44, №1, С.1-9
16. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям: пер. с нем. / Э. Камке. – 5-е изд., стереотип. – М.: Наука, 1976.
17. Казарян М.А., Ломов И.В., Шаманин И.В. Электрофизика структурированных растворов солей в жидких полярных диэлектриках. – М.: Физматлит, 2011. – 192 с
18. Казарян М.А., Ломов И.В., Шаманин И.В. Электрофизика структурированных растворов солей в жидких полярных диэлектриках. - М.:Физматлит, 2011. – 190с
19. Федеральный закон «Об основах охраны труда» от 17.07.1999 г. № 181-ФЗ.
20. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к ПЭВМ и организации работы».
21. Пожаро- и взрывобезопасность промышленных объектов. ГОСТ Р12.1.004-85 ССБТ Пожарная безопасность.
22. Способ разделения ионов металлов. Патент РФ № 2428759 (2011) / Гаврилов П.М., Гусев А.Л., Трутнев Ю.А., Казарян М.А., Шаманин И.В. и др.
23. Kazaryan M.A., Shamanin I.V., Mel'nik N.N., Lomov I.V., Dolgoplov S.Yu The Structure and Radiophysical Properties of Solutions of Salts in Liquid Polar Dielectrics // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2009, Vol. 3, No. 1, p.p. 40-45.

24. Shamanin I.V., Kazaryan M. A. Clusters Formation in Salts Solution in Polar Dielectric Liquids and Electrically-induced Separation of Solvated Ions // British Journal of Applied Science and Technology. - 2014 - Vol. 4 - №. 18, p.p. 2538-2550.

25. Shamanin I.V., Kazaryan M. A., Sidko D. F. Cluster Structure of Salt Solutions in Polar Dielectric Liquids // Advanced Materials Research. - 2015 - Vol. 1084, p.p. 97-107.

26. Пуховский Ю.П., Сахаров Д.В., Сафонова Л.П. Исследование структуры сольватных оболочек ионов Na^+ и K^+ в N,N-диметилформамиде при различной температуре методом молекулярно-динамического моделирования // Журнал структурной химии, Том 43, № 2, 2002, с. 307-316.

27. Burgess J. Metal ions in solutions. – Ellis Horwood: Chichester, UK., 1978. – 481 p.

28. Ломов И.В. Эффект электроиндуцированного селективного дрейфа катионных аквакомплексов в водных растворах солей щелочно- и редкоземельных металлов [Электронный ресурс], URL: <http://search.rsl.ru/ru/record/01003280979>.